

Adrian BÎRZU

Gelu BOURCEANU

Lavinia ONEL

DINAMICĂ NELINIARĂ

**MATRIX
ROM
BUCUREȘTI**



ADRIAN BÎRZU

GELU BOURCEANU

LAVINIA ONEL

DINAMICĂ NELINIARĂ

6 februarie 2004

Doamnei profesore Doamna Ungureanu,
cu recunoștință și afecțiune,

Adrian Birzu

MATRIX ROM
București 2003

© MATRIX ROM

C.P. 16 - 162

062510 - BUCUREȘTI

tel. 021.4113617, fax 021.4114280

e-mail: matrix@fx.ro

www.matrixrom.ro

**Editura MATRIX ROM este acreditată de
CONSILIUL NAȚIONAL AL CERCETĂRII ȘTIINȚIFICE DIN ÎNVĂȚĂMÂNTUL SUPERIOR**

Descrierea CIP a Bibliotecii Naționale a României

BÎRZU, ADRIAN

Dinamică neliniară / Adrian Bîrzu, Gelu Bourceanu, Lavinia Onel

- București: Matrix Rom, 2003

Bibliogr.

ISBN 973-685-671-2

I. Bourceanu, Gelu

II. Onel, Lavinia

544

ISBN 973 - 685 - 671 - 2

Prefață

Această lucrare a fost inspirată în principal de cursul de 'Dinamică neliniară' pe care l-a ținut în ultimii ani unul dintre autori (Adrian Bîrzu) la o secție de master a Facultății de Chimie a Universității "Al. I. Cuza" din Iași. Considerăm că ea acoperă un gol al literaturii științifice din țara noastră, în contrast cu numărul apreciabil de cărți publicate în lume, în ultimele două decenii, în acest domeniu. Cartea se adresează studenților din anii terminali ai facultăților de chimie sau fizică, interesați în însușirea noțiunilor de bază ale dinamicii neliniare. Ea poate fi, de asemenea, o sursă de informare utilă pentru cercetătorii care doresc să se familiarizeze cu dinamica neliniară.

Am acordat o atenție deosebită sistemelor chimice și electrochimice cu comportament neliniar (capitolele 7, 8 și 9). Cititorii mai puțin interesați de aceste aspecte particulare, pot găsi în primele șase capitole o prezentare de ansamblu, accesibilă, a fundamentelor dinamicii neliniare. Am căutat, ori de câte ori a fost posibil, să ilustrăm teoria prezentată cu ajutorul aplicațiilor rezolvate. Pentru parcurgerea acestei cărți, este necesară o pregătire generală în fizică, matematică (în special analiză matematică și algebră liniară) și într-o măsură mai mică, chimie.

Autorul mai sus menționat a lucrat, între 1998 și 2003, în două universități și un institut de cercetare din Germania, în domeniul dinamicii neliniare. Pentru aceste stagii de cercetare, a avut sprijinul Fundației Alexander von Humboldt, căreia îi adresează întreaga sa recunoștință.

Iași, iulie 2003

Autorii

Cuprins

1. Introducere.....	1
1.1. Clasificarea sistemelor.....	3
1.2. Comportare neliniară în fizică și chimie: câteva exemple tipice.....	8
2. Noțiuni fundamentale ale dinamicii neliniare.....	15
2.1. Sisteme dinamice cu un număr finit de grade de libertate.....	15
2.2. Spațiul fazelor.....	16
2.3. Mulțimi invariante.....	17
2.4. Sisteme conservative și disipative. Atractori.....	23
2.5. Stabilitate. Principiul stabilității liniarizate.....	27
2.6. Studiul calitativ al stabilității punctelor fixe pentru sistemele unidimensionale.....	33
3. Analiza liniară de stabilitate a stărilor staționare în sisteme punctiforme și sisteme extinse spațial.....	36
3.1. Analiza liniară de stabilitate a punctelor fixe în sisteme punctiforme.....	36
3.2. Modele pradă-prădător: sisteme Lotka-Volterra. Analiza în planul fazelor cu ajutorul nulclinelor.....	58
3.2.1. Proprietăți ale sistemului Lotka-Volterra.....	60
3.2.2. Modele pradă-prădător realiste.....	62
3.3. Metoda modurilor normale în sisteme extinse spațial.....	73
4. Bifurcații.....	78
4.1. Comportarea neliniară în jurul punctelor fixe: analiza de bifurcație.....	78
4.2. Dezvoltarea soluțiilor în serii de perturbații.....	80
4.2.1. Cazul valorii proprii zero, $\text{Re}\omega_C = \text{Im}\omega_C = 0$	80
4.2.2. Bifurcația transcritică.....	81
4.2.3. Bifurcația furcă.....	85
4.2.4. Bifurcația nod-șea.....	86
4.2.5. Bifurcația Hopf.....	87
4.3. Forma normală a bifurcațiilor.....	107
4.4. Analiza de bifurcație în sisteme extinse spațial. Formularea generală....	120
4.4.1. Analiza de bifurcație în sisteme cu extindere spațială mare:	

ecuația Ginzburg-Landau complexă.....	122
4.4.2. Alte exemple de ecuații ale formei normale în sisteme cu extindere spațială mare.....	124
5. Aplicații discrete.....	127
5.1. Recurențe unidimensionale. Aspecte generale.....	127
5.2. Aplicația logistică. Scenariul Feigenbaum de tranziție spre haos.....	134
5.3. Puncte fixe ale aplicațiilor discrete bidimensionale.....	147
6. Dinamică haotică. Scenarii de tranziție spre haos.....	159
6.1. Cascada dublărilor de perioadă în cazul aplicației logistice.....	160
6.2. Intermitențe în cazul aplicației logistice.....	163
6.3. Aplicația Poincaré. Multiplicatori caracteristici.....	165
6.4. Metoda Galerkin de reducere a unui sistem de ecuații diferențiale cu derivate parțiale la un sistem de ecuații diferențiale ordinare. Modelul Lorenz.....	169
6.5. Proprietăți ale sistemului Lorenz. Tranziții spre haos.....	176
6.6. Sistemul Rössler. Cascada bifurcațiilor subarmonice.....	181
6.7. Scenariul Ruelle-Takens.....	183
6.8. Haos spațiotemporal.....	184
7. Sisteme chimice cu comportament neliniar.....	186
7.1. Reacții chimice în domeniul liniar al termodinamicii proceselor ireversibile. Reacții chimice și fenomene de relaxare.....	187
7.2. Sisteme cu stări staționare multiple.....	189
7.3. Un model de reacție chimică cu tranziție de fază de neechilibru.....	191
7.4. Oregonatorul.....	193
7.5. Sisteme de tip activator-inhibitor.....	196
7.6. Oscilații în sistem izoterm închis.....	199
7.7. Oscilații termocinetice în sistem închis.....	204
7.8. Autocataliză în sisteme deschise cu agitare perfectă.....	212
7.9. Formarea structurilor Turing în sisteme chimice.....	219
7.10. Unde călătoare în sisteme chimice.....	225
7.11. Rolul fluctuațiilor în evoluția sistemelor chimice și biochimice.....	234

8. Dinamică neliniară în sisteme electrochimice.....	238
8.1. Circuitul echivalent al celulei electrochimice. Bistabilitate.....	239
8.2. Oscilații periodice în sisteme controlate potențiosstatic.....	242
8.3. Condițiile formării structurilor spațiotemporale.....	244
8.4. Modelarea structurilor spațiotemporale în cazul electrodisolvării anodice a metalelor.....	248
9. Clasificarea oscilatorilor chimici după mecanismul lor de reacție.....	255
9.1. Con de curenți și curenți extremi.....	256
9.2. Reprezentarea diagramatică a rețelelor și curenților chimici.....	265
9.3. Analiza stabilității rețelelor chimice.....	267
9.4. Cicluri ireversibile de curent.....	269
9.5. Clasificarea oscilatorilor chimici.....	271
9.5.1. Specii chimice neesențiale.....	272
9.5.2. Categoria 1: Oscilatori care conțin cicluri critice de curent.....	273
9.5.3. Categoria 2: Oscilatori care conțin cicluri puternice de curent.....	280
10. Metode perturbatoare utilizate în rezolvarea aproximativă a ecuațiilor neliniare de evoluție.....	282
10.1. Ecuația Duffing.....	282
10.2. Dezvoltarea directă.....	283
10.3. Tehnica Lindstedt-Poincaré.....	285
10.4. Metoda renormării.....	286
10.5. Metoda scalelor multiple.....	287
10.6. Metoda variației parametrilor.....	289
10.7. Metoda medierii.....	290
Bibliografie.....	291

1. Introducere

Alegerea acestui subiect - "Dinamică neliniară" - este legată de existența unui domeniu de cercetare cu o dinamică foarte rapidă - cel al sistemelor neliniare departe de echilibru. Acest domeniu este deosebit de complex; fundamentele sale se află în matematică (teoria ecuațiilor neliniare, teoria bifurcațiilor, teoria stabilității, mulțimi de dimensiune fracționară etc.) și fizică și are aplicații în chimie, biologie, științe sociale, filozofie etc.

Dinamica neliniară a apărut, ca domeniu de sine stătător, în anii 70, deși probleme tipice ale acestui domeniu au existat în matematică și fizică cu mult înainte. Chimia constituie cumva o excepție. Prima reacție chimică oscilantă – un subiect privilegiat al dinamicii neliniare – a fost descoperită în 1921, de către Bray. Cu toate acestea, abia după 1968, o altă reacție chimică oscilantă (numită Belousov-Zhabotinski, prescurtat BZ) a intrat în atenția comunității științifice. Dezvoltarea dinamicii neliniare, ca domeniu de cercetare, constituie, deloc întâmplător, un exemplu tipic de evoluție neliniară. În primul rând, elemente aparent disparate, din diverse științe, au început să fie privite într-o lumină nouă, care le revela intercorelația; concepte ca 'sinergetic' sau 'autoorganizare' aparțin astăzi fondului lexical de bază. În al doilea rând, dezvoltarea dinamicii neliniare oferă imaginea tipică a evoluției unei instabilități dinamice: plecând de la câteva grupe de cercetare, s-a ajuns la mii de cercetători, în întreaga lume.

Complexitatea acestui domeniu impune o abordare interdisciplinară a majorității temelor semnificative de cercetare. Acest caracter interdisciplinar este reflectat și în această lucrare. În partea a doua a acestui capitol este conturat foarte succint domeniul dinamicii neliniare. În al doilea capitol - "Noțiuni fundamentale în dinamica neliniară" - sînt prezentate noțiuni și rezultate fundamentale, atît de natură matematică cît și fizică, referitoare la sistemele neliniare. Între acestea, conceptul de stabilitate joacă un rol esențial. În următorul capitol - "Analiza liniară de stabilitate a stărilor staționare" – este prezentată metoda modurilor normale, de studiu a stabilității stărilor staționare, pentru sisteme punctiforme și pentru sisteme extinse spațial. Acestui capitol îi urmează, în mod natural, cel în care se prezintă principalele tipuri de bifurcații ce pot apărea în sistemele dinamice. Capitolul 5 prezintă un domeniu aparte

al dinamicii neliniare, cel al aplicațiilor discrete. În capitolul 6, prezentăm dinamica haotică și principalele tipuri de tranziții ce conduc la aceasta. În capitolele 7 și 9, se prezintă aspecte teoretice și rezultate experimentale legate de sistemele chimice complexe departe de echilibru. Majoritatea sistemelor chimice sunt guvernate de ecuații neliniare de evoluție. Din acest motiv, este posibilă aplicarea metodelor dinamicii neliniare pentru studiul acestora. Sistemele electrochimice, prezentate în cap. 8, au anumite caracteristici care le fac ideale pentru apariția și studiul comportamentelor neliniare. În fine, capitolul 10 prezintă anumite metode perturbative de rezolvare a ecuațiilor neliniare de evoluție.

Actualmente, dinamica neliniară reprezintă un domeniu foarte vast, cu ramificații în mai multe discipline. Vom căuta să oferim o imagine generală și accesibilă a acestui domeniu, cu detalii privind sistemele chimice și electrochimice. Dinamica neliniară și termodinamica neliniară, deși au metode diferite de studiu, aparțin aceluiași trunchi și descriu aceeași realitate fizică. Atunci când va fi cazul, vom face referire la lucrarea [1], care prezintă în mod sintetic termodinamica de neechilibru.

Ce sunt fenomenele neliniare?

Un operator $L : V \rightarrow V$ se numește liniar dacă satisface condiția [2]:

$$L(a\phi + b\psi) = aL(\phi) + bL(\psi) \quad \forall a, b \in \mathbb{R}; \phi, \psi \in V \quad (1.1)$$

unde V este un spațiu vectorial peste mulțimea numerelor reale. Un operator $N(\phi)$ se numește neliniar, dacă nu satisface condiția (1.1).

Fenomenele fizice privesc interrelațiile deterministe ale unui set de variabile fizice. Fenomenele neliniare implică seturi de variabile pentru care o schimbare inițială a unei variabile nu produce o schimbare proporțională în comportarea acelei variabile sau a alteia. Raportul acțiune/reacțiune nu este constant. Implicațiile acestei proprietăți asupra comportamentului sistemelor dinamice și diferența față de sistemele liniare vor fi prezentate în principal în capitolul următor.

1.1 Clasificarea sistemelor

De-a lungul întregii lucrări, va reveni frecvent noțiunea de *sistem dinamic*. Vom defini această noțiune într-un mod calitativ, foarte general, astfel: numim sistem dinamic orice sistem a cărui stare se modifică în timp. Observăm că această definiție include majoritatea sistemelor din Univers, de la particule elementare până la galaxii. Deși sistemele cuantice prezintă și ele anumite comportamente neliniare, în această lucrare ne vom mărgini la studiul sistemelor macroscopice.

A. Sisteme continue și sisteme discrete.

În *sistemul continuu*, toate variabilele sînt continue și timpul de evoluție este un interval de pe axa reală. Un sistem continuu poate fi descris prin ecuații diferențiale.

În *sistemul discret*, toate variabilele sînt discrete și timpul de evoluție este o mulțime numărabilă de numere reale. Un sistem discret poate fi descris cu ajutorul ecuațiilor cu diferențe, numite și recurențe.

Aplicația 1.1

Evoluția numărului de celule într-un sistem biologic simplu poate fi descrisă prin următoarea ecuație diferențială liniară:

$$\frac{dN}{dt} = (\beta - \delta)N \quad (1.2)$$

unde coeficientul β determină viteza de producere a celulelor, iar δ viteza de distrugere a acestora. Separînd variabilele, se obține

$$\frac{dN}{N} = (\beta - \delta)dt$$

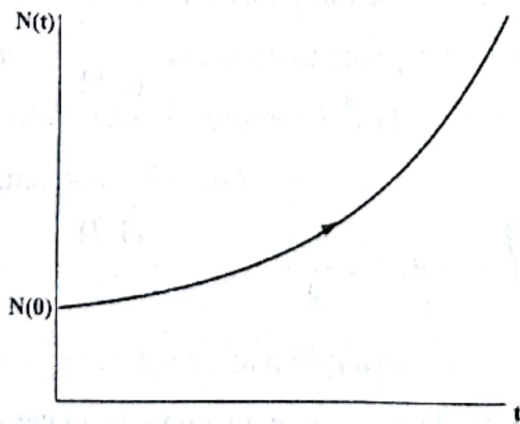


Fig. 1.1 a $\beta > \delta$

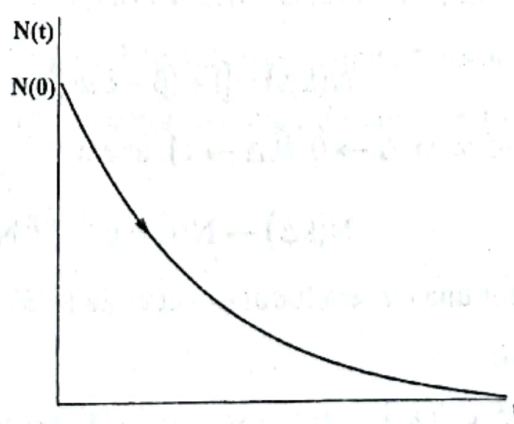


Fig. 1.1 b $\beta < \delta$

Integrând de la 0 la t , găsim

$$\int_{N(0)}^{N(t)} \frac{dN}{N} = (\beta - \delta) \int_0^t dt$$

sau

$$\ln \frac{N(t)}{N(0)} = (\beta - \delta)t$$

Numărul de celule la un moment oarecare de timp va fi

$$N(t) = N(0)e^{(\beta - \delta)t} \quad (1.3)$$

Ecuția de evoluție (1.2) fiind liniară, singurul tip de evoluție pe care îl poate descrie este creșterea sau descreșterea exponențială a numărului de celule (fig. 1.1).

Trecerea de la ecuațiile diferențiale, care descriu sistemele continue, la ecuații cu diferențe, care descriu sistemele discrete, se poate face divizând intervalul de timp, $t_k = k\Delta$. Vom prezenta calculul pentru ecuația de evoluție (1.2). Derivata în raport cu timpul poate fi scrisă

$$\frac{dN}{dt} \approx \frac{N(k\Delta) - N[(k-1)\Delta]}{\Delta} \quad (1.4)$$

dacă intervalul de timp, Δ , este suficient de mic. Înlocuind (1.4) în (1.2), găsim

$$\frac{N(k\Delta) - N[(k-1)\Delta]}{\Delta} \approx (\beta - \delta)N[(k-1)\Delta]$$

de unde

$$N(k\Delta) = [1 + (\beta - \delta)\Delta]N[(k-1)\Delta] \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (1.5)$$

Recurența (1.5) este o progresie geometrică. Expresia explicită a termenului general este

$$N(k\Delta) = [1 + (\beta - \delta)\Delta]^k N(0) \quad (1.6)$$

Pentru $k \rightarrow \infty$ și $\Delta \rightarrow 0$ ($k\Delta \rightarrow t$), avem

$$N(k\Delta) \rightarrow N(t) = e^{(\beta - \delta)t} N(0) \quad (1.7)$$

care este tot una cu rezultatul din ecuația (1.3).

Observații

1. Urmînd calea inversă, este posibilă trecerea de la o ecuație discretă la ecuația diferențială corespunzătoare.

2. Din punct de vedere matematic, trecerea de la o ecuație continuă la una discretă sau invers este simplă. Din punct de vedere al semnificației fizice, lucrurile sînt mai complicate. Nu există o corespondență biunivocă între sistemele discrete și cele continue. Ca urmare, ecuația continuă și cea discretă pot avea soluții cu comportamente complet diferite.

B. Sisteme liniare și sisteme neliniare

Sistemul dinamic se numește liniar dacă sistemul ecuațiilor de evoluție care îl descriu este liniar. În general, ecuațiile de evoluție care descriu sistemele reale sînt neliniare. Un sistem de ecuații liniare satisface principiul superpoziției. Consecințele faptului că sistemul neliniar nu satisface această proprietate sînt atît de natură matematică, cît și fizică.

Aplicația 1.2: Creșterea limitată a populației. Ecuația logistică.

În acest exemplu, este prezentat un model mai realist decît cel anterior, pentru creșterea populației. Acest model va ține cont de faptul că o colonie de celule sau bacterii conținute într-un mediu nutritiv nu va crește indefinit. O ecuație de evoluție care descrie acest proces este

$$\frac{dN}{dt} = kN - \beta N^2 \quad k > 0, \beta > 0 \quad (1.8)$$

numită *ecuația logistică*. Aici, kN reprezintă diferența dintre viteza de apariție și viteza de dispariție a celulelor și corespunde termenului $(\beta - \delta)$ din ecuația (1.2). În plus, apare al doilea termen, care limitează creșterea. Principalul factor limitator este apariția substanțelor toxice. O celulă dată suportă efectul cumulat al tuturor celor N celule, deci acest efect este proporțional cu N . Efectul toxic asupra tuturor acestor N celule este de ordinul N^2 . (1.8) se numește ecuația logistică de creștere [3]. Aceasta mai poate fi scrisă

$$\frac{dN}{dt} = N(k - \beta N) \Rightarrow \frac{dN}{N(k - \beta N)} = dt$$

Integrînd de la 0 la t , obținem

$$\int_{N(0)}^{N(t)} \frac{dN}{N(k - \beta N)} = \int_0^t dt \quad (1.9)$$

Fracția de sub prima integrală poate fi descompusă în

$$\frac{1}{kN - \beta N^2} = \frac{1}{kN} + \frac{\beta}{k(k - \beta N)}$$

de unde găsim că

$$\int_{N(0)}^{N(t)} \frac{dN}{kN - \beta N^2} = \frac{1}{k} \left[\ln \left(\frac{N}{k - \beta N} \right) - \ln \left(\frac{N_0}{k - \beta N_0} \right) \right] \quad (1.10)$$

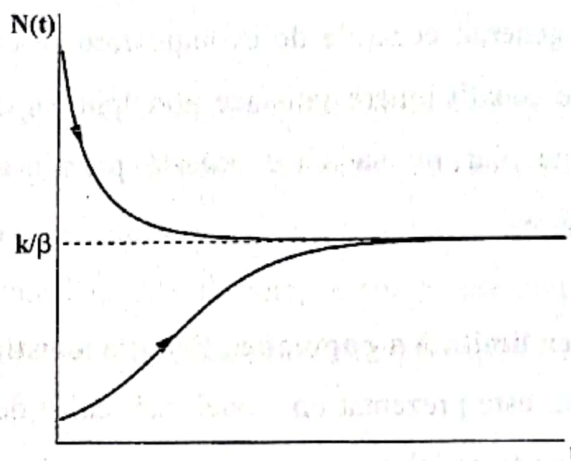


Fig. 1.2

Înlocuind (1.10) în (1.9), se obține

$$\frac{N}{k - \beta N} = \frac{N_0}{k - \beta N_0} e^{kt} \quad (1.11)$$

de unde

$$N = \frac{N_0 \frac{k}{\beta}}{N_0 + \left(\frac{k}{\beta} - N_0 \right) e^{-\beta t}} \quad (1.12)$$

Sînt posibile situațiile

$$N > \frac{k}{\beta} \Rightarrow \frac{dN}{dt} < 0 \quad (1.13)$$

$$N < \frac{k}{\beta} \Rightarrow \frac{dN}{dt} > 0 \quad (1.14)$$

De asemenea, din (1.12) se observă că

$$\lim_{t \rightarrow \infty} N(t) = \frac{k}{\beta} \quad (1.15)$$

Acest raport se numește capacitatea ecosistemului, și reprezintă valoarea atinsă asimptotic de către numărul de celule din ecosistem, indiferent de valoarea condiției inițiale. Acest număr maxim de celule depinde, conform cu (1.15), de valorile parametrilor k și β . Figura 1.2 prezintă evoluția în timp descrisă de ecuația logistică, sintetizând observațiile de mai sus.

C. Sisteme punctiforme și sisteme distribuite spațial

În cazul *sistemelor punctiforme*, variabilele dinamice au aceleași valori în orice punct al sistemului. Acesta poate fi caracterizat printr-un număr finit de variabile dinamice. Evoluția este descrisă de ecuații diferențiale ordinare

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \vec{F}(\vec{X}, \lambda) \quad (1.16)$$

unde λ reprezintă ansamblul *parametrilor de control* ai sistemului; prin modificarea acestora, se schimbă comportamentul dinamic al sistemului considerat.

Exemplu

Considerăm un reactor închis, cu agitare perfectă, la T și p constante; în reactor sînt c specii intermediare, între care au loc r reacții chimice. Starea sistemului este caracterizată de concentrațiile acestor intermediari, care sînt funcții de timp, $c_1(t), \dots, c_c(t)$. Ecuațiile de evoluție (1.16) sînt, în acest caz, ecuațiile cinetice. Datorită agitării perfecte, concentrația oricărei specii chimice poate fi considerată aceeași în orice punct al sistemului.

În cazul sistemelor chimice neomogene, pe lângă reacția chimică, are loc și procesul de difuzie. Extinderea spațială a sistemului nu mai poate fi neglijată. În absența reacțiilor chimice, concentrația oricărei specii intermediare satisface ecuația de continuitate

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{j}_i = 0 \quad (1.17)$$

care reprezintă forma microscopică a ecuației de conservare a masei. $\vec{j}_i$ reprezintă fluxul de difuzie al speciei i , adică cantitatea de compus i care traversează unitatea de suprafață în unitatea de timp. Conform legii I a lui Fick, pentru gradienti mici de concentrație, fluxul de difuzie depinde liniar de gradient

$$\vec{j}_i = -D_i \nabla c_i \quad (1.18)$$

unde D_i este coeficientul de difuzie al speciei i . Înlocuind (1.18) în (1.17), se obține ecuația de evoluție

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = F_i(\vec{c}, \lambda) + D_i \nabla^2 c_i \quad (1.19)$$

Sistemele descrise de aceste ecuații se numesc sisteme cu reacție-difuzie. Concentrația fiecărei specii intermediare din sistem este funcție de punct și de timp, $\vec{c} = \vec{c}(\vec{r}, t)$. Deoarece în volumul de reacție există o infinitate de puncte, se poate considera că sistemele extinse spațial sînt descrise de o infinitate de variabile dinamice. În cazul altor sisteme extinse spațial, de pildă sistemele hidrodinamice, atît variabilele dinamice cît și ecuațiile de evoluție sînt diferite, însă operatorul diferențial în raport cu coordonatele spațiale va fi prezent. Din prezentarea de mai sus, reiese că 'sistemele punctiforme' constituie o descriere aproximativă a sistemelor reale, deoarece toate sistemele reale sînt extinse spațial, iar omogenitatea spațială nu poate fi perfectă.

1.2. Comportare neliniară în fizică și chimie: cîteva exemple tipice

În sistemele liniare, datorită "principiului superpoziției", efectul combinat a două cauze este suprapunerea efectelor individuale. Într-un sistem neliniar, pot să apară efecte complet noi, datorate "cooperării"; mai concret, neliniaritățile din ecuațiile de evoluție reflectă existența interacțiunilor din sistemul real.

A. Comportare neliniară în mecanica clasică

A.1. Pendulul gravitațional

Considerăm un corp punctiform de masă m , suspendat de un fir inextensibil de lungime l (fig. 1.3). Poziția sistemului poate fi descrisă cu ajutorul coordonatei unghiulare θ . Abaterea față de echilibru este egală cu lungimea arcului de curbă

$$s = l\theta$$

Accelerația este

$$a = \ddot{s} = l\ddot{\theta} \quad (1.20)$$

Accelerația este dată de componenta tangențială a greutateii. Ecuația de mișcare, în acord cu principiul al II-lea al dinamicii și (1.20), este

$$-mg \sin \theta = ml\ddot{\theta}$$

de unde

$$\ddot{\theta} + \frac{g}{l} \sin \theta = 0 \quad (1.21)$$

Ecuția (1.21) este neliniară și nu posedă soluție analitică explicită. Pentru valori mici ale unghiului de oscilație θ , este valabilă aproximația

$$\sin \theta \approx \theta$$

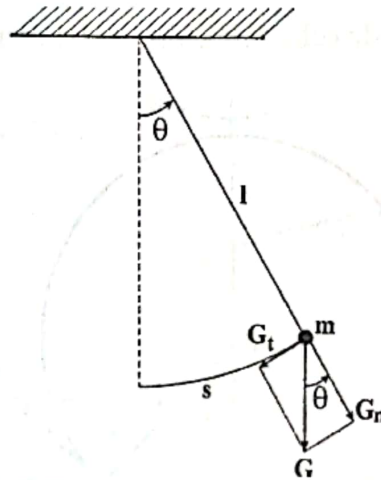


Fig. 1.3

Cu aceasta, ecuația de evoluție (1.21) devine liniară

$$\ddot{\theta} + \frac{g}{l} \theta = 0 \quad (1.22)$$

Soluțiile acesteia sînt de forma

$$\theta = A \sin(\omega_0 t + \varphi_0) \quad (1.23)$$

unde am notat cu:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{g}{l}} \quad (1.24)$$

pulsția oscilațiilor. Mișcarea descrisă de ecuația (1.23) este periodică, iar perioada de oscilație, $T_0 = 2\pi/\omega_0$, nu depinde de condiția inițială; din acest motiv, oscilațiile se numesc izocrone. Dacă oscilațiile au amplitudine mare, aproximația liniară nu mai este valabilă. Ecuția de evoluție neliniară poate fi rezolvată doar aproximativ.

Pendulul simplu nu prezintă comportamente tipic neliniare. Am prezentat acest exemplu, însă, pentru a arăta că, chiar și cele mai simple sisteme mecanice, au ecuații

neliniare de evoluție. Pe de altă parte, pendulul multiplu și pendulul forțat prezintă comportamente tipic neliniare, de exemplu cuasiperiodicitate sau haos.

A.2. Inelul rotitor

Considerăm un inel rigid vertical de rază r , în câmp gravitațional. Un corp punctiform de masă m este plasat la un unghi inițial θ_0 și se poate deplasa de-a lungul inelului, fără frecare. Dacă inelul este în repaus, corpul va realiza o mișcare periodică în jurul poziției de echilibru A (pentru $\theta_0 \neq 0$) sau va rămâne fix în A (pentru $\theta_0 = 0$). Poziția A corespunde stării de echilibru a sistemului considerat.

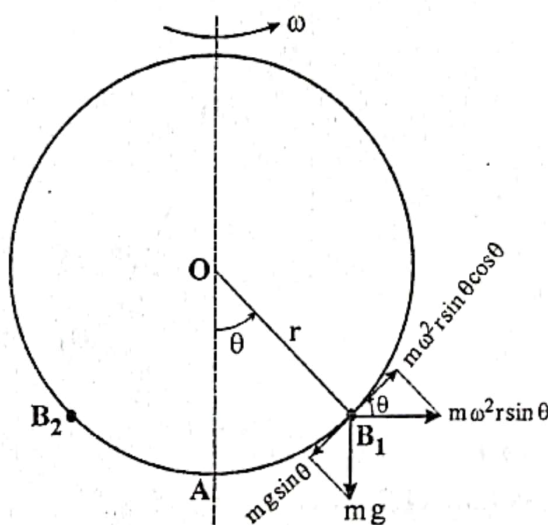


Fig. 1.4

Considerăm inelul în rotație, cu frecvență unghiulară constantă ω , ca rezultat al unei constrângeri externe. Pentru ω mic, corpul oscilează în jurul poziției de echilibru A. Dincolo de un prag critic, ω_c , masa oscilează în jurul unei noi poziții de echilibru, corespunzând unei valori nenule a unghiului θ . Există două astfel de puncte de echilibru, plasate simetric de o parte și de alta a diametrului vertical, B_1 și B_2 . Plecând de la o configurație simetrică (corpul în A), se ajunge la una asimetrică (corpul în una din cele două noi poziții de echilibru), proces numit rupere de simetrie.

Ecuția de mișcare a masei punctiforme este

$$m\ddot{\theta}r = m\omega^2 r \sin \theta \cos \theta - mg \sin \theta$$

de unde rezultă

$$\ddot{\theta} = \frac{g}{r} \left(\frac{\omega^2 r}{g} \cos \theta - 1 \right) \sin \theta \quad (1.25)$$

Sînt posibile situațiile:

- a) Pentru $\frac{\omega^2 r}{g} < 1$, $\theta_0 = 0$ este singura poziție de echilibru, și este stabilă.
- b) Pentru $\frac{\omega^2 r}{g} > 1$, $\theta_0 = 0$ devine instabilă, cu apariția a două noi poziții de echilibru stabil. Conform cu (1.25), acestea sînt

$$\theta_{1,2} = \pm \arccos\left(\frac{g}{\omega^2 r}\right) \quad (1.26)$$

Tranziția se petrece pentru $\omega_c = \sqrt{g/r}$.

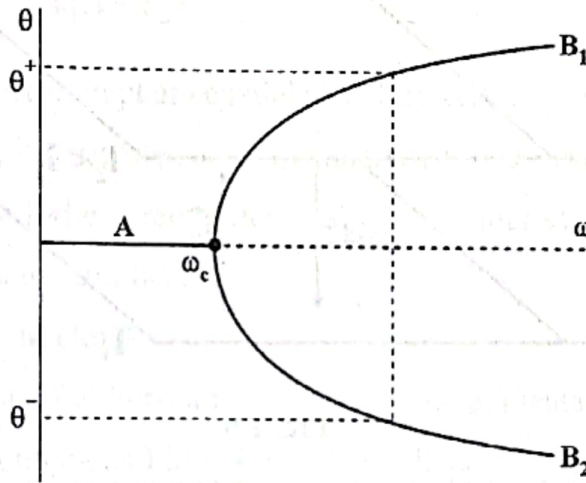


Fig. 1.5

Spunem că în $\omega = \omega_c$ are loc un proces de bifurcație. Diagrama $\theta(\omega)$, reprezentată în fig. 1.5, se numește diagramă de bifurcație. Pentru $\omega < \omega_c$, se observă în diagramă existența unei singure stări de echilibru stabil. În punctul de bifurcație această stare devine instabilă, cu apariția a două stări de echilibru stabil. Parametrul ω joacă rolul de parametru de control. La modificarea sa, comportamentul sistemului suferă, în punctul de bifurcație, o schimbare calitativă.

B. Neliniarități în sisteme termodinamice

Considerăm un sistem termodinamic, asupra căruia acționează forțele termodinamice $\{X_1, \dots, X_n\}$. Acestea vor produce fluxurile termodinamice $\{J_1, \dots, J_n\}$. Atît timp cît forțele termodinamice sînt suficient de mici, fluxurile termodinamice sînt funcții liniare de forțe [1],

$$J_i = \sum_{j=1}^n L_{ij} X_j \quad i = \overline{1, n} \quad (1.27)$$

Ecuatiile (1.27) se numesc ecuații fenomenologice, iar L_{ij} sînt coeficienți fenomenologici. Atunci cînd relațiile (1.27) sînt satisfăcute, spunem cã sistemul se află în domeniul liniar al termodinamicii proceselor ireversibile. În acest domeniu, sistemul va tinde întotdeauna cãtre o stare staționară stabilă [1]. Dacă forțele termodinamice sînt suficient de mari, relațiile (1.27) nu mai sînt satisfăcute. Este posibil ca stările staționare ale sistemului sã devinã instabile și în sistem sã aparã structuri ordonate.

Pentru exemplificare, considerăm celulele de convecție Bénard (fig. 1.6) [3].

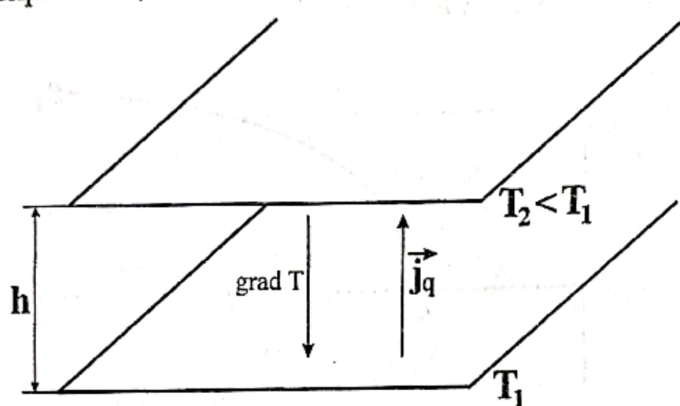


Fig. 1.6

Un lichid cuprins între două plăci conductoare termic este încălzit de dedesubt. Pentru sistemul Bénard, parametrul de control este gradientul de temperatură între cele două plăci,

$$\nabla T = \frac{T_1 - T_2}{h}$$

- Pentru gradienti mici de temperatură, transportul de căldură se realizează numai prin conducție, fluidul fiind în repaus.
- Peste o valoare critică a gradientului de temperatură, starea staționară de repaus devine instabilă. Fluctuațiile de densitate se amplifică, iar în sistem apar structuri ordonate, numite rulouri de convecție (fig. 1.7).

Considerăm o picătură de fluid, care devine mai caldă decît fluidul înconjurător, ca urmare a unei fluctuații de temperatură. Densitatea sa fiind mai mică, asupra sa acționează o forță ascensională. Picătura tinde să se deplaseze spre zone din ce în ce

mai reci ale fluidului, deci forța ascensională crește și instabilitatea se amplifică. Pe de altă parte, instabilitatea este atenuată datorită vîscozității și conducției termice.

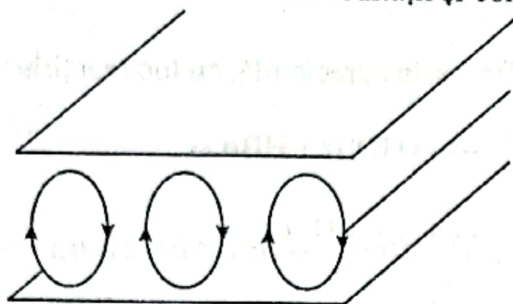


Fig. 1.7

Evoluția amplitudinii fluctuației este descrisă de o ecuație neliniară de evoluție [4],

$$\frac{dA}{dt} = c_1 A - c_2 A^3 \quad (1.28)$$

Primul termen din membrul drept al ecuației (1.28) descrie amplificarea fluctuației. Al doilea termen, neliniar, descrie atenuarea fluctuației datorită vîscozității și conducției termice. În funcție de valorile parametrilor c_1 și c_2 , sistemul se poate găsi de o parte sau de alta a pragului de instabilitate.

C. Fenomene neliniare în chimie

Considerăm reacția BZ într-un reactor deschis cu alimentare continuă și agitare perfectă (în engleză, Continuous Flow Stirred Tank Reactor, prescurtat CSTR). Drept parametri de control putem considera concentrațiile la intrarea în reactor și timpul de staționare în reactor. Inversul timpului de staționare este

$$\frac{1}{\tau} = \frac{J}{V} \quad (1.29)$$

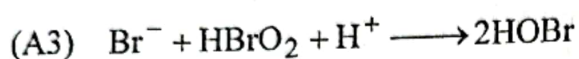
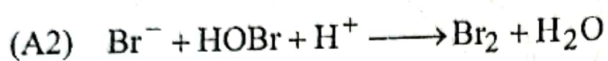
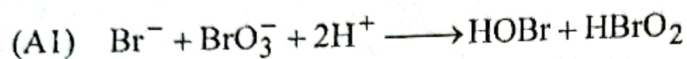
unde J reprezintă fluxul volumic de intrare, iar V volumul reactorului. Pentru fluxuri de intrare mici, compușii rămîn în reactor un timp foarte lung, și sistemul atinge o stare staționară.

Există un prag critic τ_c , dincolo de care starea staționară devine instabilă și sistemul prezintă oscilații întreținute. Apariția acestui nou regim este asociată cu ruperea simetriei translaționale în raport cu timpul. Modificarea ulterioară a timpului de staționare conduce la oscilații periodice complexe și apoi la haos.

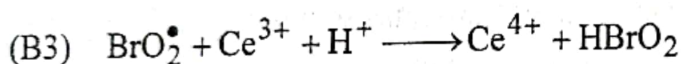
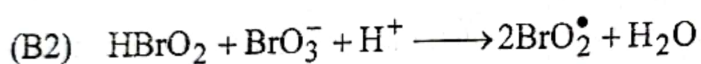
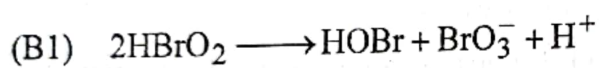
O explicație calitativă a comportării oscilante în reacția BZ a fost propusă de Field, Körös și Noyes [3]. Reacția implică două procese diferite, A și B, care domină

alternativ cinetica, în timp ce al treilea proces, C, este responsabil pentru comutarea între A și B.

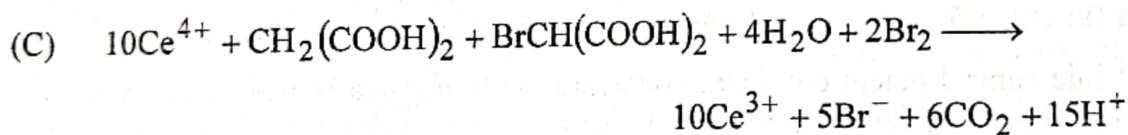
Cînd concentrația Br^- este apreciabilă, au loc reacțiile



Pentru o valoare suficient de mică a concentrației ionului Br^- , oxidarea Ce^{3+} la Ce^{4+} are loc autocatalitic, datorită eliberării radicalului liber $\text{BrO}_2^\bullet$,



Două molecule de HBrO_2 sînt produse în (B3) pentru fiecare consumată în (B2). Ce^{4+} este redus înapoi la Ce^{3+} , regenerînd Br^- ,



Cei doi factori care determină oscilațiile periodice sînt alternanța între A și B, și autocataliza.

2. Noțiuni fundamentale ale dinamicii neliniare

În capitolul precedent, am prezentat câteva dintre noțiunile caracteristice dinamicii neliniare. În cele ce urmează, vom da o descriere mai precisă a acestor noțiuni, însoțită de exemple.

2.1. Sisteme dinamice cu un număr finit de grade de libertate

Evoluția în timp a variabilelor de stare ale unui sistem guvernat de legile fizicii clasice este descrisă de un set de ecuații diferențiale de ordinul I. Acestea pot fi ordinare, ca în cazul reacțiilor chimice ce au loc în CSTR, sau cu derivate parțiale, ca în dinamica fluidelor, sisteme cu reacție difuzie etc. În acest ultim caz, sistemul prezintă un număr infinit de grade de libertate, valorile variabilelor de stare (care acum sînt cîmpuri scalare sau vectoriale) în fiecare punct al spațiului, ca funcții de timp.

Pentru un sistem punctiform, asupra căruia acționează constrîngerii independente de timp, ecuațiile de evoluție au forma

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \vec{F}(\vec{X}, \lambda) \quad (2.1)$$

Sistemul implică un număr de parametri λ , numiți parametri de control, reflectînd structura sa internă (de exemplu coeficientul de vîscozitate sau coeficientul de difuzie) sau modul în care sistemul comunică cu mediul (gradienti de temperatură pe frontieră, timp de staționare în CSTR etc.). Deoarece constrîngerile nu depind de timp, acesta nu apare explicit în membrul drept al ecuației (2.1). Ecuațiile diferențiale cu această proprietate se numesc autonome. În cele ce urmează, ne vom ocupa numai de sisteme autonome.

Pentru specificarea completă a problemei matematice (respectiv a comportării sistemului fizic), trebuie cunoscută și condiția inițială

$$\vec{X}(t_0) = \vec{X}_0 \quad (2.2)$$

Ansamblul ecuațiilor (2.1) și (2.2) poartă numele de problema Cauchy. Soluția unui sistem cu timp continuu există pentru orice t , în condițiile specificate de teorema de existență și unicitate a lui Cauchy.

2.2. Spațiul fazelor

Considerăm oscilatorul liniar armonic, a cărui evoluție este descrisă de ecuația

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0 \quad (2.3)$$

a cărui soluție este periodică în timp, de forma

$$x = A \sin(\omega_0 t + \varphi_0) \quad (2.4)$$

Ecuația diferențială de ordinul al doilea (2.3) poate fi scrisă ca un sistem de două ecuații diferențiale de ordinul I

$$\begin{cases} \dot{v} + \omega_0^2 x = 0 \\ \dot{x} = v \end{cases} \quad (2.5)$$

Prin urmare, starea instantanee a sistemului este descrisă de setul variabilelor de stare coordonată și viteză, (x, v) . Evoluția oscilatorului poate fi urmărită reprezentând coordonata și viteza funcție de timp. Această reprezentare, $x = x(t)$ și $v = v(t)$, este echivalentă cu studiul dinamicii în spațiul variabilelor de stare, (x, v) , numit *spațiu al fazelor*. Din (2.4) rezultă că viteza este:

$$v = \omega_0 A \cos(\omega_0 t + \varphi_0) \quad (2.6)$$

Eliminând timpul din ecuațiile (2.4) și (2.6), se obține ecuația traiectoriilor din spațiul fazelor

$$\left(\frac{x}{A}\right)^2 + \left(\frac{v}{\omega_0 A}\right)^2 = 1 \quad (2.7)$$

care reprezintă ecuația unei elipse (fig. 2.1).

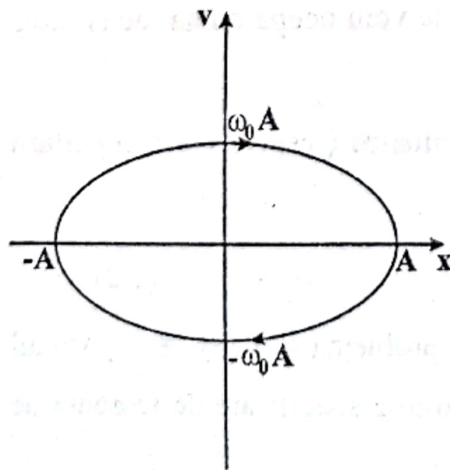


Fig. 2.1

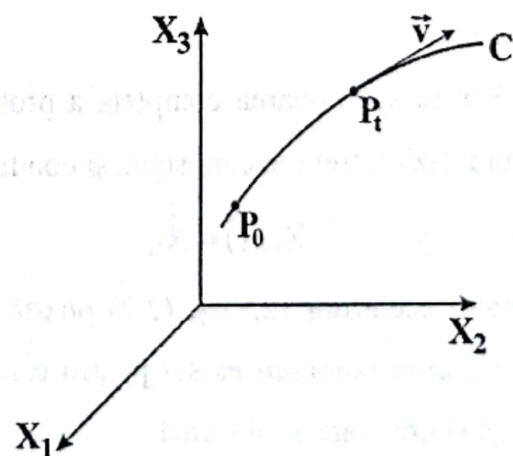


Fig. 2.2

În general, evoluția unui sistem descris de n variabile (numit și sistem de dimensiune n) poate fi urmărită în spațiul n -dimensional al variabilelor dinamice, $(X_1, \dots, X_n)$, numit spațiul fazelor, Γ . O stare instantanee a sistemului este dată de un set particular de valori $(X_1, \dots, X_n)$, deci acestea îi corespunde un punct unic P din spațiul fazelor, numit punct reprezentativ. Reciproc, un punct fazic P definește în mod unic starea sistemului. Există deci o corespondență biunivocă între stările fizice ale sistemului considerat și punctele spațiului fazic.

Considerăm o succesiune de stări $(\bar{X}_0, \dots, \bar{X}_t, \dots)$, atinse în decursul timpului. Acestea vor determina în spațiul fazelor o succesiune de puncte $(P_0, \dots, P_t, \dots)$ situate pe o curbă C , numită *traietorie fazică* (fig. 2.2). Viteza de deplasare a punctului reprezentativ de-a lungul traiectoriei fazice, $\bar{v} = (v_1, \dots, v_n)$, este tangentă la traiectoria fazică. Datorită analogiei cu sistemele hidrodinamice, se vorbește de o ‘curgere a fluidului fazic’.

Numim punctele pentru care

$$\vec{F}(\bar{X}, \lambda) = 0 \quad (2.8)$$

puncte singulare. Într-un sistem autonom, punctele singulare rămân fixe în spațiul fazelor în timp, de aceea se numesc și *puncte fixe*. În conformitate cu ecuația (2.1), punctele fixe corespund stărilor staționare ale sistemului considerat. Ansamblul traiectoriilor fazice și al punctelor singulare constituie *portretul fazic* al sistemului. Dacă sînt satisfăcute condițiile specificate de teorema lui Cauchy, orice soluție a unui sistem autonom este unic determinată de condiția inițială. Soluțiile distincte nu se pot intersecta, sau o soluție dată nu se poate auto-intersecta, cu excepția punctelor fixe.

2.3. Mulțimi invariante

Acestea reprezintă obiecte din spațiul fazelor care sînt mărginite și au proprietatea că orice traiectorie care are condiția inițială într-o mulțime invariantă, va reveni în aceasta, unde va rămîne pentru $t \longrightarrow \infty$ [3]. Noțiunea de mulțime invariantă reflectă deci comportarea asimptotică a sistemului dinamic considerat. Considerăm numai mulțimi invariante de dimensiune strict mai mică decît a spațiului

fazelor. Punctele fixe sînt un exemplu de mulțime invariantă, de dimensiune zero. Un alt exemplu este constituit de curbele închise, care nu conțin puncte fixe. Acestea corespund unui comportament periodic. Curbele respective reprezintă mulțimi de dimensiune unu. O soluție periodică este izolată dacă în vecinătatea sa nu mai există nici o altă soluție periodică. În cazul autonom, o soluție periodică izolată este numită ciclu limită. Tipul mulțimilor invariante ale unui sistem dinamic depinde de dimensiunea sistemului.

A. Sisteme cu o variabilă

Dimensiunea sistemului fiind unu, mulțimile invariante pot fi doar de dimensiune zero ($d = 0$). Singurele mulțimi invariante posibile sînt punctele fixe. Sînt posibile situațiile:

(a) sistemul posedă un singur punct fix.

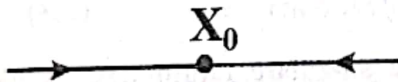


Fig. 2.3 a

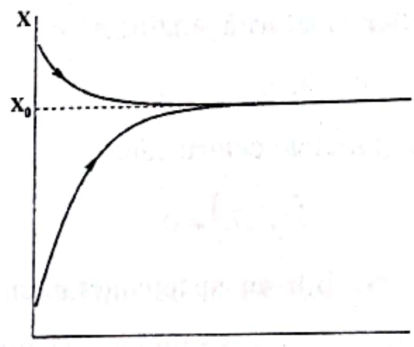


Fig. 2.3 b

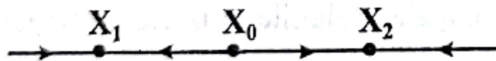


Fig. 2.4 a

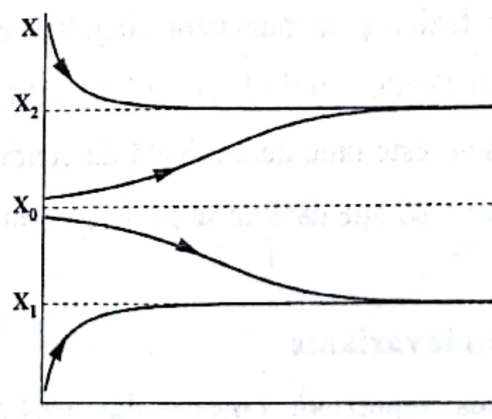


Fig. 2.4 b

În spațiul fazelor, toate traiectoriile converg către punctul fix, care este un atractor (fig. 2.3 a). În timp, variabilele dinamice converg monoton către valoarea corespunzătoare stării staționare (fig. 2.3b). De asemenea, punctul fix poate respinge traiectoriile fazice, caz în care se numește *punct fix respingător* (engl. 'repellor'). Și în acest caz, condiția

fizică de a avea o traiectorie mărginită implică convergența traiectoriilor către alte puncte fixe; divergența la infinit este exclusă.

(b) sistemul posedă mai multe puncte fixe. Punctul fix X_0 respinge traiectoriile fazice, care sînt atrase de X_1 și X_2 (fig. 2.4 a și b).

B. Sisteme cu două variabile

Sînt posibile situațiile $d = 0$ (punct fix) sau 1 (curbă invariantă). O mulțime invariantă unidimensională poate fi o curbă închisă fără puncte fixe, numită ciclu limită.

Aplicația 2.1

Considerăm ecuația van der Pol [5]

$$\ddot{x} + \mu(x^2 - 1)\dot{x} + x = 0 \quad (2.9)$$

care este echivalentă cu sistemul

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = \mu(1 - x^2)y - x \end{cases} \quad (2.10)$$

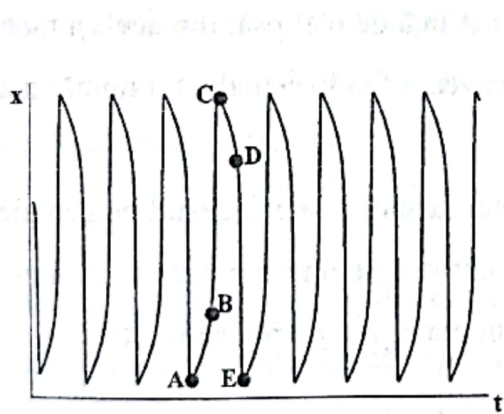


Fig. 2.5 a

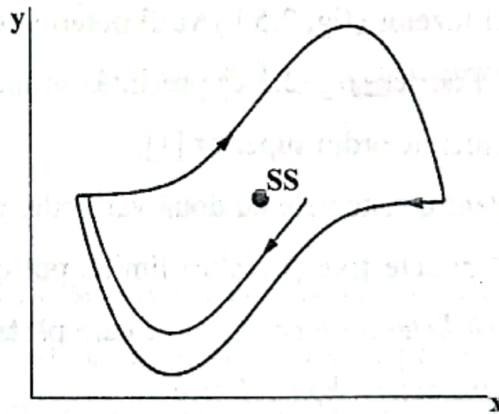


Fig. 2.5 b

Ecuația (2.9) este asemănătoare cu ecuația oscilatorului amortizat

$$\ddot{x} + \delta\dot{x} + x = 0 \quad (2.11)$$

unde δ este coeficientul de amortizare. În ecuația (2.9), termenul de amortizare, $\mu(x^2 - 1)$, este negativ pentru $|x| < 1$, implicînd o expansiune a soluției, și pozitiv pentru $|x| > 1$, indicînd o contracție a soluției. Există un ciclu limită în jurul originii (a stării staționare). În fig. 2.5 sînt prezentate evoluția în timp, portretul fazelor și spectrul de putere pentru exemplul considerat.

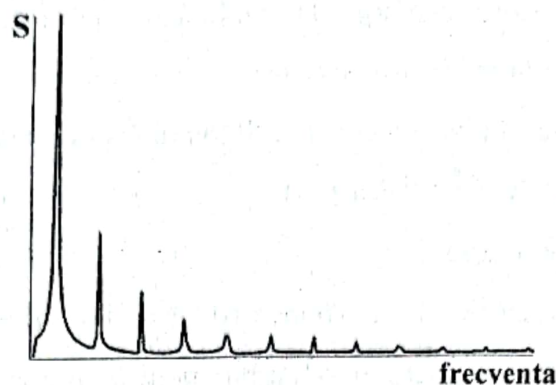


Fig. 2.5 c

Pentru o valoare suficient de mare a parametrului μ (în cazul fig. 2.5, $\mu = 5$), oscilațiile periodice sînt *oscilații de relaxare* (fig. 2.5 a). Graficul evoluției în timp este mult diferit de o sinusoidă. În decursul unei perioade (A-E în fig. 2.5 a), alternează evoluții lente (A-B și C-D) și evoluții rapide (B-C și D-E). Cele două tipuri de evoluții au loc după scale de timp diferite. Astfel de evoluții sînt tipice în cazul sistemelor chimice oscilante, pentru care constantele cinetice de viteză pot fi mult diferite, chiar cu ordine de mărime. Ca urmare a abaterii evoluției în timp față de o sinusoidă și portretul fazelor (fig. 2.5 b) va fi puternic deformat față de o elipsă; din același motiv, spectrul Fourier (fig. 2.5 c) prezintă, pe lângă frecvența fundamentală, un număr mare de armonici de ordin superior [1].

Pentru sistemele cu două variabile, portretul fazelor poate fi destul de complex. Pe lângă puncte fixe și cicluri limită, pot exista curbe care unesc puncte fixe, numite *traietorii heteroclinice*. Curbele care părăsesc un punct fix și apoi se reîntorc la el se numesc *traietorii homoclinice*.

Datorită teoremei Cauchy, este interzisă intersecția traiectoriilor fazice în afara punctelor fixe. Aceasta face ca sistemele dinamice de dimensiune unu sau doi să nu poată prezenta mulțimi invariante prea complicate. Rezultă că este posibil doar un comportament asimptotic simplu pentru astfel de sisteme (stare staționară pentru sistemele unidimensionale, stare staționară sau ciclu limită pentru sistemele bidimensionale).

C. Sisteme cu 3 sau mai multe variabile.

Față de situațiile precedente, este posibil în plus și $d = 2$. Atractorul corespunzînd acestei dimensiuni este torul (fig. 2.6).

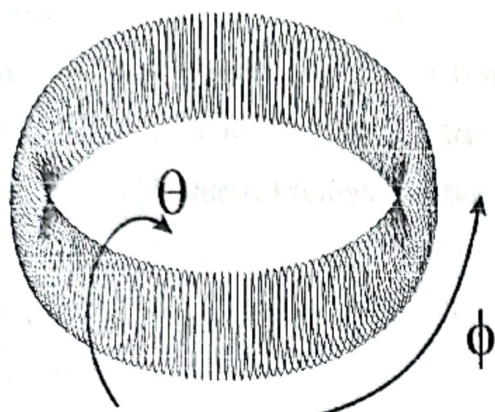


Fig. 2.6

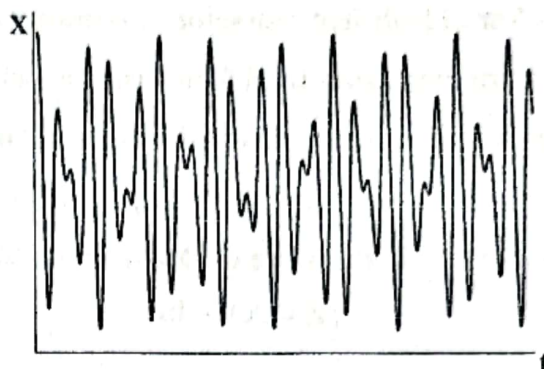


Fig. 2.7

Mișcarea unui punct fazic care se deplasează pe tor poate fi descrisă cu ajutorul a două coordonate, θ și ϕ . Ca urmare, mișcarea va fi biperiodică. Dacă perioadele T_1 și T_2 sînt rațional corelate

$$\frac{T_1}{T_2} = \frac{p}{q} \quad (p, q \in \mathbb{Z}, q \neq 0) \quad (2.12)$$

atunci mișcarea se reduce la una periodică. Dacă raportul este irațional, mișcarea este *cuasiperiodică*, iar traiectoria pe tor nu se închide niciodată.

În general, o funcție se numește *cuasiperiodică* dacă poate fi exprimată ca o sumă de funcții periodice

$$X(t) = \sum_i h_i(t)$$

unde funcțiile periodice h_i au perioadele T_i . O soluție *cuasiperiodică* cu p frecvențe de bază se numește *p-periodică*. Spectrul de putere al unei funcții *cuasiperiodice* constă din linii la frecvențele de bază (armonicile fundamentale) și la multipli întregi ale acestora (armonici de ordin superior). În plus apar combinații liniare ale frecvențelor de bază.

Exemplu:

$$X(t) = 1,2 \cos(2\pi t) + \cos(2\pi\sqrt{2}t)$$

reprezintă o funcție biperiodică (fig. 2.7). Raportul frecvențelor de bază este irațional. Frecvențele se numesc *incomensurabile*.

D. Mulțimi fractale

Am identificat atractorii corespunzători stării staționare (punctul fix), comportării periodice (curbă închisă) și comportării cuasiperiodice (torul). Căutăm atractorul corespunzător mișcării *haotice*. Considerăm sistemul Lorenz [5]

$$\begin{cases} \dot{X} = \sigma(Y - X) \\ \dot{Y} = rX - XZ - Y \\ \dot{Z} = XY - bZ \end{cases} \quad (2.13)$$

Pentru anumite regiuni din spațiul parametrilor, sistemul (2.13) prezintă o dinamică haotică. Pentru rezultatele prezentate în fig. 2.8, am luat $\sigma = 16$; $r = 45,92$; $b = 4$.

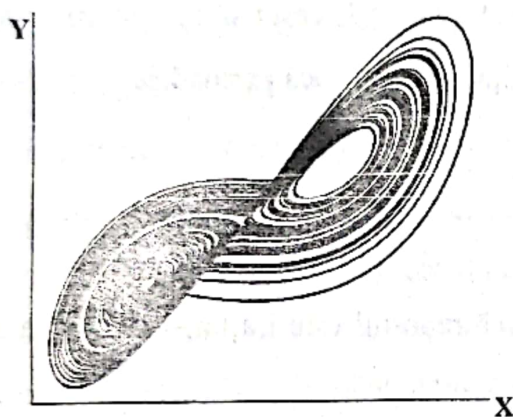


Fig. 2.8 a

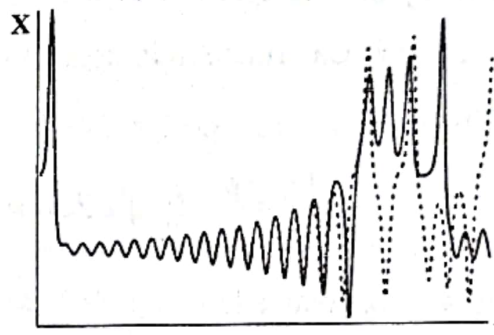


Fig. 2.8 b

Fig. 2.8 a prezintă proiecția portretului fazelor pe planul (X,Y). Traectoriile fazice acoperă dens o anumită regiune, mărginită, din spațiul fazelor. În acest caz, traectoriile fazice diverg, pînă cînd devin necorelate, sistemul prezentînd proprietatea de sensibilitate în raport cu condițiile inițiale (SCI). Fig. 2.8 b prezintă evoluția temporală corespunzătoare la două condiții inițiale foarte apropiate. Din acest motiv, comportarea sistemelor haotice este, după un timp suficient de lung, impredictibilă.

Există obiecte geometrice care nu sînt nici puncte ($d = 0$), nici curbe ($d = 1$), nici suprafețe ($d = 2$) sau hipersuprafețe ($d \geq 3$). Ele sînt intermediare între dimensiunile d și $d + 1$: deși volumul lor în spațiul $d + 1$ dimensional este zero, ele nu pot fi descrise în spațiul d dimensional [1]. Acestea se numesc obiecte de dimensiune fracționară sau *fractali*. Mulțimea invariantă corespunzătoare comportamentului haotic constă într-o infinitate de 'straturi', încît o secțiune transversală a acestora este o mulțime fractală, vizitată succesiv de traectoria fazică într-un mod impredictibil. Într-un spațiu bidimensional, acest lucru nu se poate realiza fără auto-intersecția

D. Mulțimi fractale

Am identificat atractorii corespunzători stării staționare (punctul fix), comportării periodice (curbă închisă) și comportării cuasiperiodice (torul). Căutăm atractorul corespunzător mișcării *haotice*. Considerăm sistemul Lorenz [5]

$$\begin{cases} \dot{X} = \sigma(Y - X) \\ \dot{Y} = rX - XZ - Y \\ \dot{Z} = XY - bZ \end{cases} \quad (2.13)$$

Pentru anumite regiuni din spațiul parametrilor, sistemul (2.13) prezintă o dinamică haotică. Pentru rezultatele prezentate în fig. 2.8, am luat $\sigma = 16$; $r = 45,92$; $b = 4$.

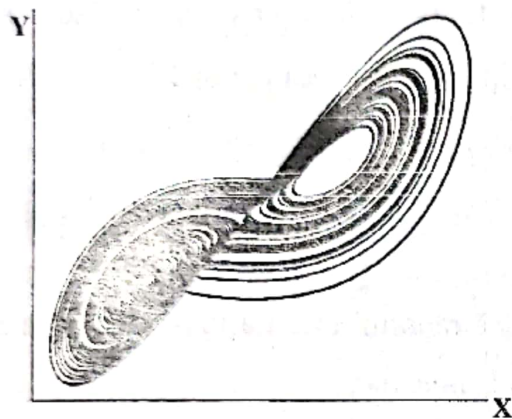


Fig. 2.8 a

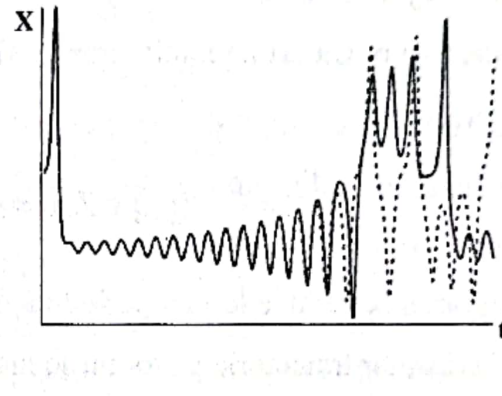


Fig. 2.8 b

Fig. 2.8 a prezintă proiecția portretului fazelor pe planul (X,Y). Traectoriile fazice acoperă dens o anumită regiune, mărginită, din spațiul fazelor. În acest caz, traectoriile fazice diverg, pînă cînd devin necorelate, sistemul prezentînd proprietatea de sensibilitate în raport cu condițiile inițiale (SCI). Fig. 2.8 b prezintă evoluția temporală corespunzătoare la două condiții inițiale foarte apropiate. Din acest motiv, comportarea sistemelor haotice este, după un timp suficient de lung, impredictibilă.

Există obiecte geometrice care nu sînt nici puncte ($d = 0$), nici curbe ($d = 1$), nici suprafețe ($d = 2$) sau hipersuprafețe ($d \geq 3$). Ele sînt intermediare între dimensiunile d și $d + 1$: deși volumul lor în spațiul $d + 1$ dimensional este zero, ele nu pot fi descrise în spațiul d dimensional [1]. Acestea se numesc obiecte de dimensiune fracționară sau *fractali*. Mulțimea invariantă corespunzătoare comportamentului haotic constă într-o infinitate de 'straturi', încît o secțiune transversală a acestora este o mulțime fractală, vizitată succesiv de traectoria fazică într-un mod impredictibil. Într-un spațiu bidimensional, acest lucru nu se poate realiza fără auto-intersecția

traietoriilor (fapt exclus de teorema Cauchy). Într-un spațiu de dimensiune mai mare sau egală cu trei, configurația devine posibilă, printr-un proces de pliere succesivă. Astfel de obiecte, numite seturi stranii (atractori stranii) corespund comportamentului haotic. Obiectele fractale au întotdeauna o 'structură fină'; modificând scara de observație, această structură poate fi observată. Fractalii se bucură, de obicei, de proprietatea de self-similitudine: la orice scară, obiectele observate sînt copii conforme ale celui original.

2.4 Sisteme conservative și disipative. Atractori.

Considerăm un sistem dinamic descris de ecuația de evoluție (2.1)

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \vec{F}(\vec{X}, \lambda)$$

Specificarea stării sistemului, $\vec{X} = (X_1, \dots, X_n)$, la un moment dat, permite, cel puțin în principiu, prezicerea stării la orice moment ulterior. Această proprietate este legată de caracterul determinist al sistemului dinamic respectiv. În realitate, procesul de măsură are precizie finită. Starea sistemului nu va fi specificată de un punct fazic, ci de un volum $\Delta\Gamma_0$ înconjurînd acel punct [3]. Gibbs a introdus noțiunea de ansamblu statistic: un număr foarte mare de sisteme identice (avînd aceeași lege de evoluție și aceleași constrîngerii externe), dar cu condiții inițiale diferite. Mărimile caracteristice sînt: $p_{\Delta\Gamma}(t)$ = probabilitatea ca sistemul să se afle în volumul fazic $\Delta\Gamma$ la momentul t ; ρ = densitatea de probabilitate corespunzătoare.

Relația între acestea este

$$p_{\Delta\Gamma}(t) = \rho(X_1, \dots, X_n, t) dX_1 \dots dX_n \quad (2.14)$$

unde

$$\rho = \frac{1}{N_{\text{tot}}} \lim_{\Delta\Gamma \rightarrow 0} \frac{\Delta N}{\Delta\Gamma} \quad (2.15)$$

ΔN este numărul de stări corespunzătoare volumului fazic $\Delta\Gamma$, iar N_{tot} este numărul total de stări fazice accesibile. În cazul comportamentului complex (haotic), mișcarea fazică devine foarte complexă și nu mai este practic să discutăm despre traiectorii individuale. Descrierea probabilistă furnizează o alternativă valabilă pentru

caracterizarea dinamicii sistemelor complexe.

Pentru a prezice probabilitatea de a găsi o valoare particulară a variabilelor de stare $\{X_i\}$, trebuie găsită o ecuație de evoluție pentru densitatea de probabilitate ρ . Datorită teoremei de existență și unicitate a lui Cauchy, numărul de traiectorii fizice care pornesc dintr-o mulțime dată de condiții inițiale se conservă

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial}{\partial X_i} (\rho F_i) = 0 \quad (2.16)$$

de unde

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_i F_i \frac{\partial \rho}{\partial X_i} = -\rho \nabla \cdot \vec{F}$$

sau

$$\frac{d \ln \rho}{dt} = -\nabla \cdot \vec{F} \quad (2.17)$$

unde $\nabla \cdot \vec{F}$ reprezintă divergența în raport cu coordonatele spațiului fazelor. Integrând (2.17) de la 0 la t , obținem

$$\frac{1}{t} \ln \frac{\rho_t}{\rho_0} = -\frac{1}{t} \int_0^t \nabla \cdot \vec{F} dt' = -\overline{(\nabla \cdot \vec{F})}_t \quad (2.18)$$

Cu (2.15), (2.18) devine

$$\frac{1}{t} \ln \frac{\Delta \Gamma_t}{\Delta \Gamma_0} = \overline{(\nabla \cdot \vec{F})}_t \quad (2.19)$$

unde bara plasată deasupra unei expresii semnifică media acesteia în raport cu timpul.

A. Sisteme conservative

Un sistem dinamic se numește *conservativ* dacă [3]

$$\overline{(\nabla \cdot \vec{F})}_t = 0 \quad (2.20)$$

În acest caz, din (2.19) rezultă

$$\Delta \Gamma_t = \Delta \Gamma_0 \quad (2.21)$$

Volumul fazic se conservă pe parcursul evoluției sistemelor conservative. Fig. 2.19 ilustrează această proprietate în cazul oscilatorului liniar armonnic. Ecuațiile de evoluție sînt (2.5)

$$\begin{cases} \dot{x} = v \\ \dot{v} = -\omega_0^2 x \end{cases}$$

De aici rezultă că

$$\nabla \cdot \mathbf{F} = \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_v}{\partial v} = 0 \quad (2.22)$$

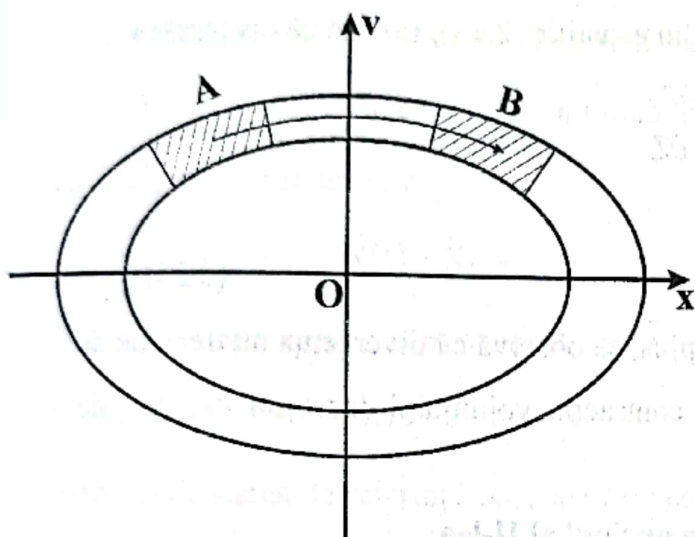


Fig. 2.9

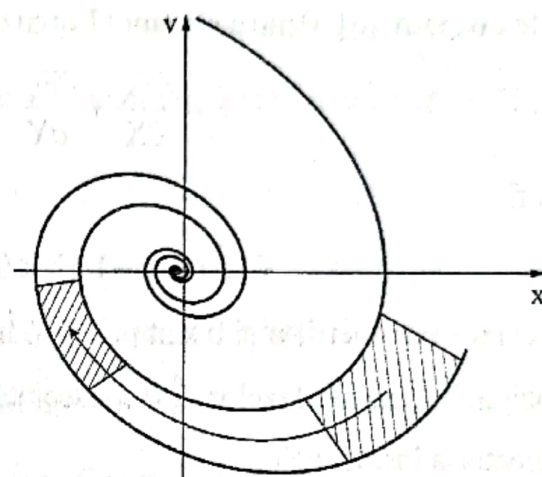


Fig. 2.10

Punctele fazice aflate inițial pe suprafața A vor ajunge, după un anumit timp, în B, care are aceeași arie a suprafeței.

B. Sisteme disipative

Într-un sistem neconservativ, $\nabla \cdot \vec{F} \neq 0$. Sistemele *dissipative* satisfac în plus [3]

$$\overline{(\nabla \cdot \vec{F})}_t < 0, t \geq t_0 \quad (2.23)$$

Aceasta este o condiție de natură fizică, care exclude divergența la infinit a traiectoriilor fazice. Pentru aceste sisteme, există în medie o contracție a volumului fazic

$$\Delta\Gamma_t < \Delta\Gamma_0, t \geq t_0 \quad (2.24)$$

Fig. 2.10 ilustrează această proprietate în cazul oscilatorului amortizat. Pentru $t \rightarrow \infty$, traiectoriile sistemului disipativ, care pornesc dintr-un volum fazic dat $\Delta\Gamma_0$, vor tinde către o submulțime a spațiului fazelor de volum zero, deci de dimensiune strict mai mică decât dimensiunea spațiului fazelor. Această mulțime se numește *atractor* al sistemului dinamic. *Bazinul de atracție* al unui atractor constituie ansamblul condițiilor inițiale cărora le corespund traiectorii care tind la atractorul respectiv.

Exemplu

Sistemul Lorenz, descris de ecuațiile (2.13)

$$\begin{cases} \dot{X} = \sigma(Y - X) \\ \dot{Y} = rX - XZ - Y \\ \dot{Z} = XY - bZ \end{cases}$$

este disipativ [6]. Pentru sistemul Lorenz, din ecuațiile (2.13), rezultă că divergența

$$\nabla \cdot \vec{F} = \frac{\partial F_X}{\partial X} + \frac{\partial F_Y}{\partial Y} + \frac{\partial F_Z}{\partial Z}$$

va fi

$$\nabla \cdot \vec{F} = -\sigma - 1 - b < 0 \quad (2.25)$$

deoarece parametrii σ și b sînt pozitivi. În plus, se observă că divergența nu depinde de poziția în spațiul fazelor. În consecință, contracția volumului fazic nu depinde de traiectoria individuală.

Comportarea asimptotică a sistemelor de ordinul al II-lea

Sistemele autonome de ordinul al II-lea, de forma

$$\begin{cases} \dot{X} = F(X, Y) \\ \dot{Y} = G(X, Y) \end{cases} \quad (2.26)$$

sînt limitate în comportarea lor asimptotică pentru $t \rightarrow \infty$. Este valabil următorul rezultat [5]:

Teoremă (Poincaré - Bendixon)

Dacă traiectoria fazică rămîne mărginită cînd $t \rightarrow \infty$ și nu este, nici nu tinde la un punct singular, atunci traiectoria fie este, fie tinde la o soluție periodică.

Această teoremă este importantă, deoarece specifică condițiile în care sistemele disipative prezintă un comportament periodic, de tip ciclu limită.

2.5. Stabilitate. Principiul stabilității liniarizate.

Considerăm un sistem care evoluează în acord cu ecuația (2.1)

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \vec{F}(\vec{X}, \lambda)$$

Presupunem că, după un timp dat, sistemul atinge o stare $\vec{X}_S$ pe o mulțime invariantă.

Sistemul este supus perturbațiilor interne și fluctuațiilor. Ne interesează stabilitatea

stării $\vec{X}_S$ în raport cu acestea. Starea instantanee a sistemului, $\vec{X}(t)$, diferă față de $\vec{X}_S$ cu $\vec{x}(t)$, numit *perturbație*

$$\vec{X}(t) = \vec{X}_S + \vec{x}(t) \quad (2.27)$$

$\vec{X}_S$ se numește *soluție neperturbată*, iar $\vec{X}(t)$ este *soluția perturbată*. Ne interesează răspunsul $\vec{x}(t)$ al sistemului dinamic la o deviație inițială $\vec{x}(0)$: sistemul rămâne apropiat de starea de referință $\vec{X}_S$, sau deviază semnificativ de la aceasta?

Într-un spațiu normat, soluția de referință $\vec{X}_S$ este *stabilă* dacă

$$\forall \varepsilon > 0 \exists \delta(\varepsilon) > 0 \quad |\vec{x}(0)| < \delta(\varepsilon) \Rightarrow |\vec{x}(t)| < \varepsilon \quad \forall t \geq t_0 \quad (2.28)$$

Soluția neperturbată este stabilă dacă toate traiectoriile care sînt inițial vecine cu aceasta rămîn vecine cu $\vec{X}_S$ la orice moment ulterior. Altfel spus, soluția de referință este stabilă dacă răspunsul la o mică perturbație rămîne mic cînd $t \rightarrow \infty$. Dacă traiectoria neperturbată, $\vec{X}_S$, nu satisface această condiție, spunem că este *instabilă*.

$\vec{X}_S$ este *asimptotic stabilă* dacă este stabilă și în plus $|\vec{x}(t)| \rightarrow 0$ cînd $t \rightarrow \infty$.

Traectoria neperturbată este asimptotic stabilă dacă toate traiectoriile inițial vecine cu aceasta converg către ea cînd $t \rightarrow \infty$. Răspunsul la o mică perturbație tinde la zero cînd $t \rightarrow \infty$.

Principiul stabilității liniarizate

Căutăm ecuația de evoluție a perturbației. Atît traiectoria perturbată cît și traiectoria de referință satisfac ecuația (2.1)

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \vec{F}(\vec{X}, \lambda) \text{ și } \frac{d\vec{X}_S}{dt} = \vec{F}(\vec{X}_S, \lambda) \quad (2.29)$$

Soluția perturbată este, în acord cu (2.27)

$$\vec{X}(t) = \vec{X}_S + \vec{x}(t)$$

Din (2.27) și (2.29), rezultă că perturbația satisface

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{F}(\vec{X}_S + \vec{x}, \lambda) - \vec{F}(\vec{X}_S, \lambda) \quad (2.30)$$

Dezvoltăm $\vec{F}$ în serie Taylor în jurul lui $\vec{X}_S$

$$\vec{F}(\vec{X}_S + \vec{x}, \lambda) = \vec{F}(\vec{X}_S, \lambda) + \left(\frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{X}} \right)_{\vec{X}_S} \cdot \vec{x} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \vec{F}}{\partial \vec{X} \partial \vec{X}} \right)_{\vec{X}_S} \cdot \vec{x} \vec{x} + \dots \quad (2.31)$$

Înlocuind (2.31) în (2.30), obținem

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = L(\lambda) \cdot \vec{x} + \vec{h}(\vec{x}, \lambda) \quad (2.32)$$

unde

$$L(\lambda) = \left(\frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{X}} \right)_{\vec{X}_S} \quad (2.33)$$

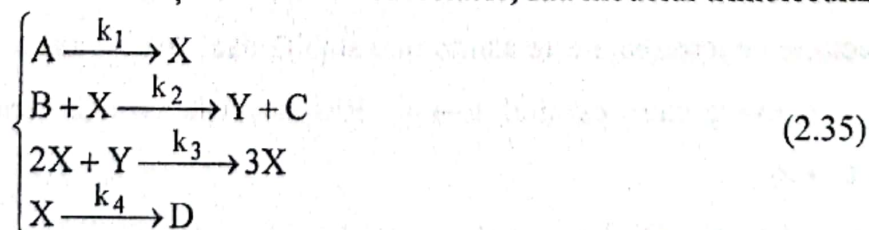
este operatorul liniar corespunzător ecuației de evoluție neliniare (2.1). Elementele acestuia reprezintă tocmai elementele matricei Jacobiene, evaluate pentru traiectoria de referință. Mărimea

$$\vec{h}(\vec{x}, \lambda) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \vec{F}}{\partial \vec{X} \partial \vec{X}} \right)_{\vec{X}_S} \cdot \vec{x} \vec{x} + \dots \quad (2.34)$$

reprezintă termenul neliniar din ecuația de evoluție a perturbației.

Aplicația 2.2

Considerăm modelul reacțional numit Brusselator, sau modelul trimolecular [7]



A și B alimentează sistemul și concentrațiile lor sînt presupuse constante. X și Y reprezintă specii intermediare. Pentru simplitate, presupunem constantele cinetice egale cu unitatea. Scrieți ecuațiile cinetice și deduceți expresiile lui L și $\vec{h}$.

Rezolvare

Ecuatiile cinetice au forma

$$\begin{cases} \frac{dc_X}{dt} = c_A - c_B c_X + c_X^2 c_Y - c_X = F_X(c_X, c_Y) \\ \frac{dc_Y}{dt} = c_B c_X - c_X^2 c_Y = F_Y(c_X, c_Y) \end{cases} \quad (2.36)$$

Sistemul prezintă un singur punct fix

$$\begin{cases} c_{X_0} = c_A \\ c_{Y_0} = \frac{c_B}{c_A} \end{cases} \quad (2.37)$$

Soluția perturbată are forma

$$\begin{cases} c_X = c_{X_0} + \delta c_X \\ c_Y = c_{Y_0} + \delta c_Y \end{cases} \quad (2.38)$$

Prin calcul se obține că operatorul liniar este

$$L = \left(\frac{\partial F_i}{\partial c_j} \right)_0 = \begin{pmatrix} c_B - 1 & c_A^2 \\ -c_B & -c_A^2 \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

iar termenul neliniar are forma

$$\bar{h} = \begin{pmatrix} \frac{c_B}{c_A} (\delta c_X)^2 + 2c_A \delta c_X \delta c_Y + (\delta c_X)^2 \delta c_Y \\ -\frac{c_B}{c_A} (\delta c_X)^2 - 2c_A \delta c_X \delta c_Y - (\delta c_X)^2 \delta c_Y \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

Principiul stabilității liniarizate compară proprietățile de stabilitate ale problemei inițiale, neliniare, (2.32) și problemei liniarizate

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = L(\lambda) \cdot \vec{x} \quad (2.41)$$

Teoremă (principiul stabilității liniarizate)

Dacă soluția banală, $\vec{x} = 0$, a problemei liniarizate (2.41) este asimptotic stabilă, atunci $\vec{x} = 0$ este soluție asimptotic stabilă a problemei neliniare (2.32). Dacă soluția banală, $\vec{x} = 0$, a problemei liniarizate este instabilă, atunci $\vec{x} = 0$ este soluție instabilă a problemei neliniare.

Acest rezultat permite reducerea studiului stabilității problemei neliniare, pentru care, în general, nu se poate găsi soluție analitică, la studiul problemei liniare, pentru care rezolvarea este imediată. Aceasta conduce, în cazul stărilor staționare, la

procedeul de analiză numit metoda modurilor normale, procedeu ce va fi prezentat în capitolul următor.

Aplicația 2.3

Rezolvând ecuația diferențială ce descrie traiectoriile fazice în coordonate carteziane,

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (2.42)$$

sau în coordonate polare plane,

$$\frac{d\rho}{d\theta} = f(\rho, \theta) \quad (2.43)$$

trasați portretul fazelor pentru sistemele bidimensionale descrise de următoarele ecuații de evoluție [8]. Discutați, în mod calitativ, stabilitatea punctelor fixe.

$$a) \dot{x} = x; \dot{y} = 2y; \quad (2.44)$$

$$b) \dot{x} = -3x; \dot{y} = -2y; \quad (2.45)$$

$$c) \dot{x} = -x + y; \dot{y} = -x - y; \quad (2.46)$$

$$d) \dot{x} = 3y; \dot{y} = -3x; \quad (2.47)$$

$$e) \dot{x} = 2x; \dot{y} = 2y. \quad (2.48)$$

Rezolvare

a) Din ecuațiile de evoluție (2.44) rezultă, pentru $x \neq 0$ și $y \neq 0$

$$\frac{dy}{dx} = 2 \frac{y}{x}$$

Separând variabilele, obținem

$$\frac{dy}{y} = 2 \frac{dx}{x} \Rightarrow \ln y = 2 \ln x + c_1$$

Ecuația traiectoriei este

$$y = cx^2 \quad (2.49)$$

Pentru fiecare valoare a constantei c , se obține o traiectorie distinctă. Există, în plus, patru traiectorii de-a lungul axelor de coordonate. Toate traiectoriile diverg din origine, care este un punct fix instabil, numit *nod instabil* (fig. 2.11 a).

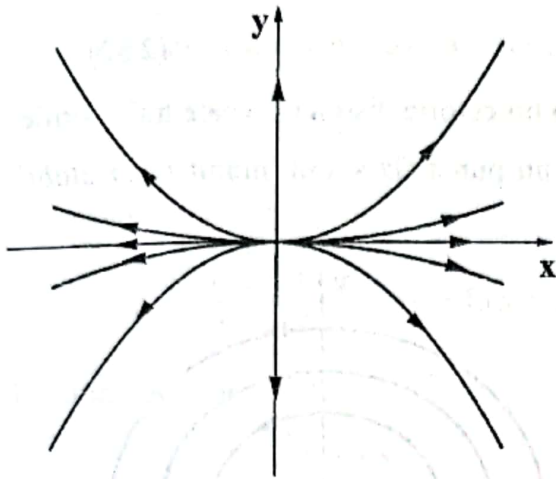


Fig. 2.11 a

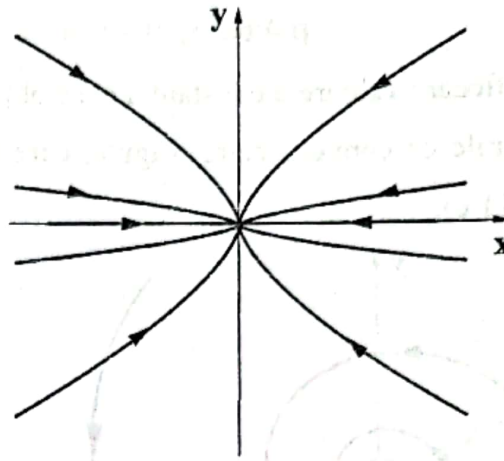


Fig. 2.11 b

b) Din ecuațiile de evoluție (2.45) se obține, pentru $x \neq 0$ și $y \neq 0$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{2y}{3x}$$

Separând variabilele, obținem

$$\frac{dy}{y} = \frac{2}{3} \frac{dx}{x} \Rightarrow \ln y = \frac{2}{3} \ln x + c_1$$

Ecuția traiectoriei este

$$y = cx^{2/3} \quad (2.50)$$

Pentru fiecare valoare a constantei c , se obține o traiectorie distinctă. Există, în plus, patru traiectorii de-a lungul axelor de coordonate. Toate traiectoriile converg către origine, care este un punct fix stabil, numit *nod stabil* (fig. 2.11 b).

c) Trecem, în sistemul ecuațiilor de evoluție (2.46), la coordonate polare plane

$$\begin{cases} x = \rho \cos \theta \\ y = \rho \sin \theta \end{cases}$$

Se obțin ecuațiile de evoluție

$$\begin{cases} \dot{\rho} = -\rho \\ \dot{\theta} = -1 \end{cases} \quad (2.51)$$

Raportul acestora este

$$\frac{d\rho}{d\theta} = \rho \Rightarrow \frac{d\rho}{\rho} = d\theta$$

Soluția acestei ecuații este de forma

$$\rho = ce^\theta \quad (2.52)$$

Pentru fiecare valoare a constantei c , se obține o traiectorie distinctă. Toate traiectoriile sînt spirale ce converg către origine, care este un punct fix stabil, numit *focar stabil* (fig. 2.11 c).

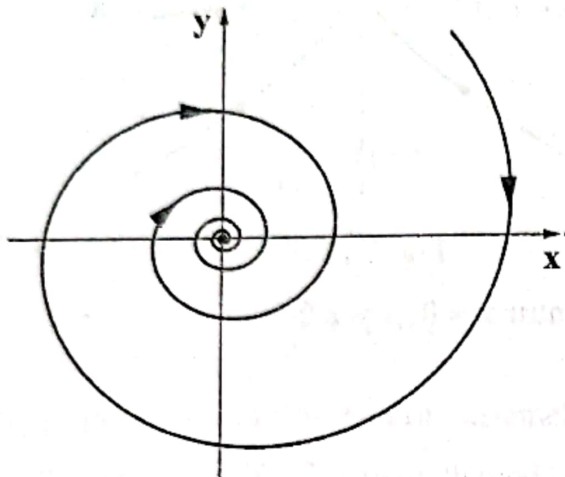


Fig. 2.11 c

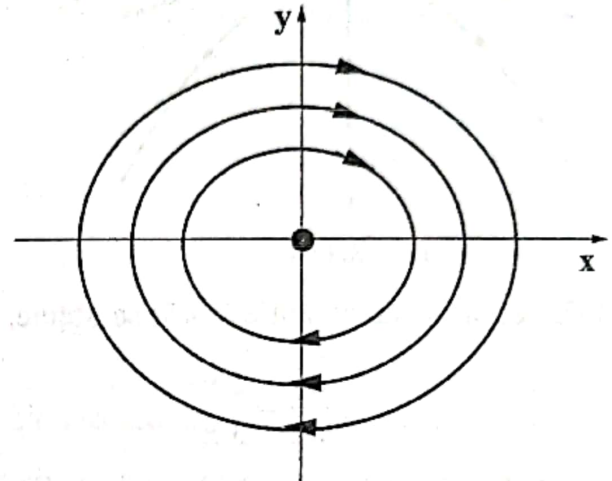


Fig. 2.11 d

d) Din ecuațiile de evoluție (2.47) rezultă

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{x}{y}$$

Separînd variabilele, obținem $y \, dy = -x \, dx$. Ecuația traiectoriei este

$$x^2 + y^2 = c \quad (2.53)$$

Pentru fiecare valoare a constantei c , se obține o traiectorie distinctă. Toate traiectoriile sînt cercuri în jurul originii, care este un punct fix cu *stabilitate marginală*, numit *centru* (fig. 2.11 d). Stabilitatea marginală corespunde tranziției de la stabilitate la instabilitate și este asemănătoare echilibrului indiferent din mecanică.

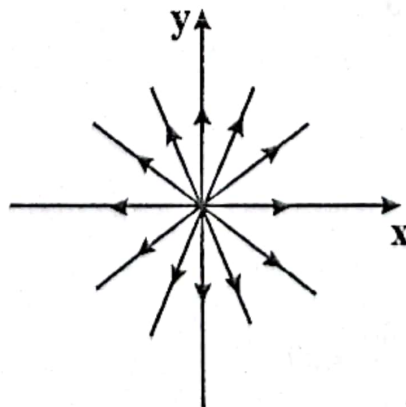


Fig. 2.11 e

e) Din ecuațiile de evoluție (2.48) rezultă, pentru $x \neq 0$ și $y \neq 0$

$$\frac{dy}{dx} = \frac{y}{x}$$

Separând variabilele, obținem

$$\frac{dy}{y} = \frac{dx}{x} \Rightarrow \ln y = \ln x + c_1$$

Ecuația traiectoriei este

$$y = cx \quad (2.54)$$

Pentru fiecare valoare a constantei c , se obține o traiectorie distinctă. Există, în plus, patru traiectorii de-a lungul axelor de coordonate. Toate traiectoriile sînt semidrepte ce diverg din origine, care este un punct fix instabil, numit *nod stelar instabil* (fig. 2.11 e).

2.6 Studiul calitativ al stabilității punctelor fixe pentru sistemele unidimensionale

Considerăm ecuația de evoluție

$$\dot{x} = f(x) \quad (2.55)$$

Punctele fixe ale ecuațiilor de acest tip pot fi găsite, iar apoi se poate determina stabilitatea acestora, utilizînd metoda grafică descrisă mai jos [5]. Considerăm ecuația ce descrie creșterea limitată a populației, numită ecuația logistică, (1.8)

$$\frac{dN}{dt} = f(N) = kN - \beta N^2 \quad k > 0, \beta > 0$$

Aceasta poate fi scrisă sub forma

$$\frac{dN}{dt} = kN \left(1 - \frac{\beta}{k} N \right) \quad (2.56)$$

Reprezentînd grafic $f(N)$, se obține fig. 2.12. Sistemul descris de (2.56) admite două puncte fixe

$$\begin{cases} N_{01} = 0 \\ N_{02} = k/\beta \end{cases} \quad (2.57)$$

Pentru orice altă valoare a lui N , funcția f este nenulă, iar semnul său ne arată dacă N crește sau scade, deoarece $\dot{N} = f(N)$.

Pentru orice altă valoare a lui N , funcția f este nenulă, iar semnul său ne arată dacă N crește sau scade, deoarece $\dot{N} = f(N)$.

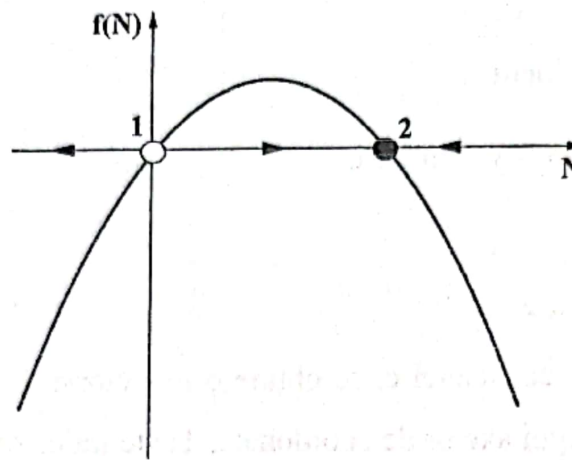


Fig. 2.12

La stînga stării staționare 1, f este sub axă, deci N scade. Între stările staționare 1 și 2, f este pozitiv, deci N crește. La dreapta stării staționare 2, f este negativ, deci N scade. Ca urmare, traiectoriile fazice diverg din starea staționară 1, care este instabilă (și este reprezentată cu un cerc gol în fig. 2.12), și converg către starea staționară 2, care este stabilă (și este reprezentată cu un cerc plin). Doar soluțiile cu $N > 0$ au semnificație fizică, deoarece N reprezintă numărul de membri ai unei populații.

Aplicația 2.4

Utilizînd metoda grafică descrisă mai sus, găsiți punctele fixe și analizați stabilitatea acestora pentru sistemele descrise de ecuațiile [5]:

$$a) \dot{x} = x^2 - 1 \quad (2.58)$$

$$b) \dot{x} = x - x^3 \quad (2.59)$$

$$c) \dot{x} = -x^3 \quad (2.60)$$

$$d) \dot{x} = x^3 \quad (2.61)$$

Rezolvare

Graficele corespunzătoare ecuațiilor de evoluție (2.58)- (2.61) sînt prezentate în fig. 2.13 a-d.

a) Sistemul admite două stări staționare,

$$x_{01} = -1 \text{ și } x_{02} = 1$$

dintre care starea staționară 1 este stabilă, iar 2 este instabilă.

b) Sistemul admite trei stări staționare:

$$x_{01} = -1; x_{02} = 0 \text{ și } x_{03} = 1$$

Stările 1 și 3 sînt stabile, iar starea staționară intermediară, 2, este instabilă.

d) Există o singură stare staționară, $x_0 = 0$, care este stabilă.

e) Există o singură stare staționară, $x_0 = 0$, care este instabilă.

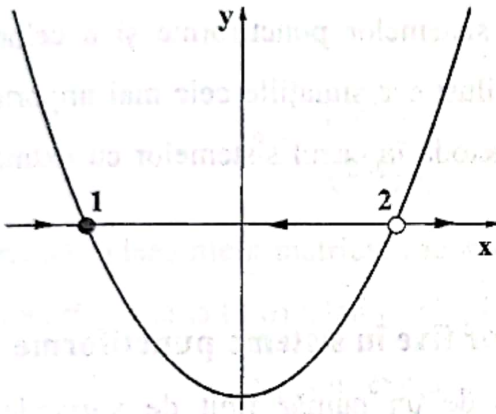


Fig. 2.13 a

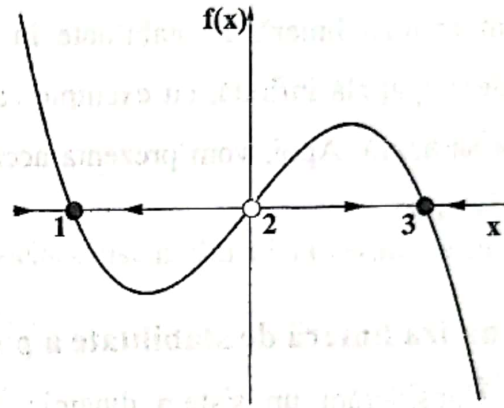


Fig. 2.13 b

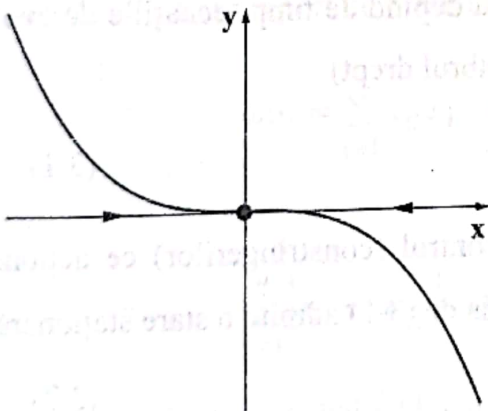


Fig. 2.13 c

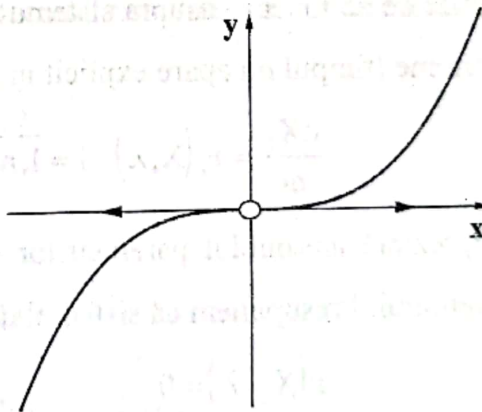


Fig. 2.13 d

3. Analiza liniară de stabilitate a stărilor staționare în sisteme punctiforme și sisteme extinse spațial

Principiul stabilității liniarizate oferă un instrument eficient de studiu a stabilității punctelor fixe, prin înlocuirea sistemului, de obicei neliniar, al ecuațiilor de evoluție, cu varianta sa liniarizată. Prin rezolvarea problemei de vectori și valori proprii care rezultă, poate fi determinată stabilitatea stărilor staționare. Vom prezenta succint analiza liniară de stabilitate în cazul sistemelor punctiforme și a celor cu extindere spațială infinită, cu exemple care să ilustreze situațiile cele mai importante ce pot să apară. Apoi, vom prezenta această metodă în cazul sistemelor cu extindere spațială finită.

3.1 Analiza liniară de stabilitate a punctelor fixe în sisteme punctiforme

Considerăm un sistem dinamic descris de un număr finit de variabile, n . Evoluția acestuia este descrisă de un sistem de ecuații diferențiale ordinare. Dacă constrângerile ce acționează asupra sistemului nu depind de timp, ecuațiile de evoluție vor fi autonome (timpul nu apare explicit în membrul drept)

$$\frac{dX_i}{dt} = F_i(\bar{X}, \lambda) \quad i = \overline{1, n} \quad (3.1)$$

unde λ reprezintă ansamblul parametrilor de control (constrângerilor) ce acționează asupra sistemului. Presupunem că sistemul descris de (3.1) admite o stare staționară

$$\bar{F}(\bar{X}_0, \lambda) = 0 \quad (3.2)$$

Studiem stabilitatea acesteia, aplicînd metoda micilor perturbații. Soluția perturbată este

$$\bar{X} = \bar{X}_0 + \bar{x} \quad (3.3)$$

Înlocuind (3.3) în (3.1), rezultă

$$\frac{d(\bar{X}_0 + \bar{x})}{dt} = \bar{F}(\bar{X}_0 + \bar{x}, \lambda) \quad (3.4)$$

Dezvoltăm $\bar{F}$ în serie Taylor în jurul stării staționare. Considerînd că perturbațiile sînt mici, reținem în această dezvoltare primii doi termeni

$$F_i(\vec{X}_0 + \vec{x}, \lambda) \approx F_i(\vec{X}_0, \lambda) + \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial F_i}{\partial X_j} \right)_0 x_j \quad (3.5)$$

Ținând cont de condiția de staționaritate (3.2) și înlocuind (3.5) în (3.4), rezultă ecuația de evoluție a perturbațiilor

$$\frac{dx_i}{dt} \approx \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \quad i = \overline{1, n} \quad (3.6)$$

unde

$$a_{ij} = \left(\frac{\partial F_i}{\partial X_j} \right)_0 \quad i, j = \overline{1, n} \quad (3.7)$$

reprezintă elementele matricei Jacobiene asociată sistemului (3.1), evaluate la starea staționară. Ecuația (3.6) admite soluții de forma

$$x_j = u_j \exp(i\omega t) \quad j = \overline{1, n} \quad (3.8)$$

numite *moduri normale*. ω se numește *valoarea proprie* asociată vectorului propriu u_j . Derivînd (3.8) în raport cu timpul și înlocuind rezultatul în (3.6), rezultă

$$\omega u_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} u_j \quad i = \overline{1, n}$$

sau

$$\sum_{j=1}^n [a_{ij} - \omega \delta_{ij}] u_j = 0 \quad i = \overline{1, n} \quad (3.9)$$

Pentru ca sistemul de ecuații algebrice liniare și omogene (3.9) să admită soluție nebanală, trebuie ca

$$\det[a_{ij} - \omega \delta_{ij}] = 0 \quad (3.10)$$

numită *ecuație caracteristică*. Aceasta este o ecuație polinomială de ordinul n în ω

$$\omega^n + a_{n-1} \omega^{n-1} + \dots + a_1 \omega + a_0 = 0$$

Soluțiile acesteia sînt, în general, mărimi complexe

$$\omega = \omega_r + i\omega_i \quad (3.11)$$

Conform cu (3.3), (3.8) și (3.11), soluția perturbată va fi

$$X_i = X_{0i} + u_i e^{\omega_r t} e^{i\omega_i t} \quad (3.12)$$

unde vectorii proprii u_i depind de valoarea inițială a perturbațiilor. Termenul $e^{i\omega t}$ descrie o evoluție periodică în timp, în jurul stării staționare. Stabilitatea stării staționare este determinată de termenul $e^{\omega_r t}$:

- dacă $\omega_r < 0$, perturbația inițială este atenuată și starea staționară este asimptotic stabilă.
- dacă $\omega_r > 0$, perturbația inițială se amplifică în timp și starea staționară este instabilă. Sistemul poate evolua către o dinamică mai complicată.
- cele două situații sînt separate de cazul stabilității marginale, $\omega_r = 0$. Aceasta reprezintă condiția de trecere de la stabilitate la instabilitate [3,7].

Utilizînd această metodă, trebuie să avem mereu în vedere că rezultatele obținute sînt valabile doar în vecinătatea stării staționare. Pentru a studia analitic stabilitatea stărilor staționare, sistemul ecuațiilor algebrice neliniare ce rezultă din condiția de staționaritate trebuie rezolvat analitic. În general acest lucru nu este posibil, și starea staționară se determină numeric.

Aplicația 3.1

Studiați stabilitatea stărilor staționare prin metoda modurilor normale pentru sistemul unidimensional descris de ecuația de evoluție

$$\dot{x} = x - x^3 \quad (3.13)$$

Rezolvare

Pentru sistemele unidimensionale, de forma

$$\dot{X} = F(X) \quad (3.14)$$

ecuația caracteristică, (3.10), se reduce la

$$\omega = \left(\frac{dF}{dX} \right)_0 \quad (3.15)$$

care este un număr real. Pentru exemplul considerat, valoarea proprie este

$$\omega = 1 - 3X_0^2 \quad (3.16)$$

Ecuația (3.13) admite următoarele puncte fixe:

$$X_{01} = -1; X_{02} = 0; X_{03} = 1$$

Valorile proprii corespunzătoare acestora sînt, în acord cu (3.16)

$$\omega_1 = \omega_3 = -2; \omega_2 = 1$$

Rezultă că stările staționare 1 și 3 sînt stabile, iar starea staționară intermediară, 2, este instabilă. Fig. 3.1 prezintă evoluția în timp corespunzătoare ecuației (3.13), pentru diverse condiții inițiale.

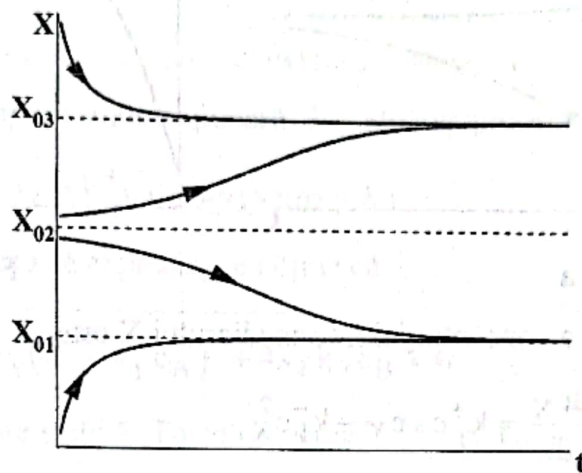


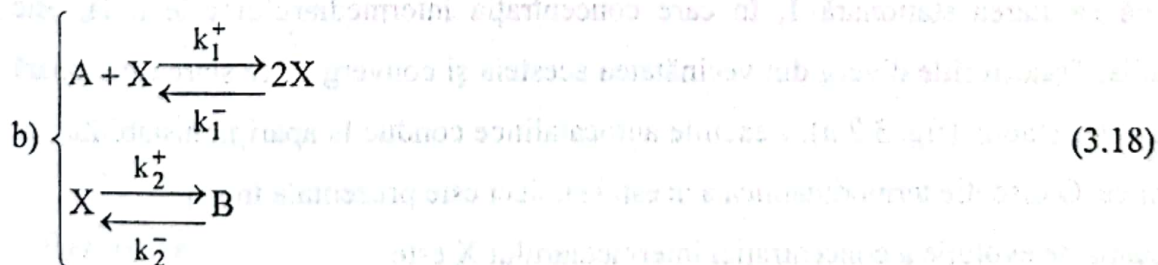
Fig. 3.1

Aplicația 3.2

Într-un reactor au loc următoarele reacții chimice reversibile [9]



Reactantul A alimentează reactorul; concentrația sa este constantă și joacă rolul de parametru de control. Intermediarul X este produs autocatalitic în această reacție.



Pe lângă reacția autocatalitică de la (a), mai are loc reacția reversibilă de conversie a intermediarului X în produsul de reacție B.

În ambele situații, determinați stările staționare și studiați stabilitatea acestora prin metoda modurilor normale. Pentru ce valori ale parametrului de control, stările staționare pot deveni instabile?

Rezolvare

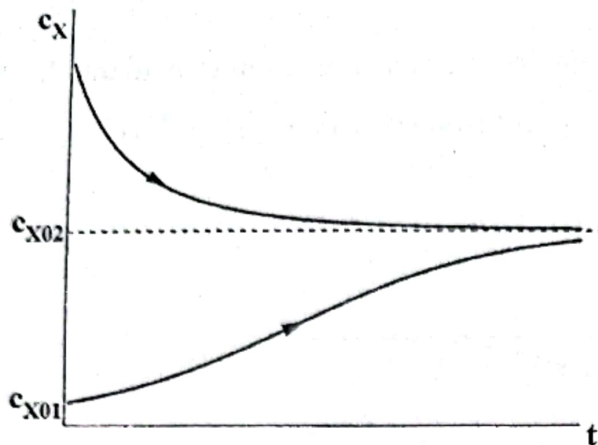


Fig. 3.2 a

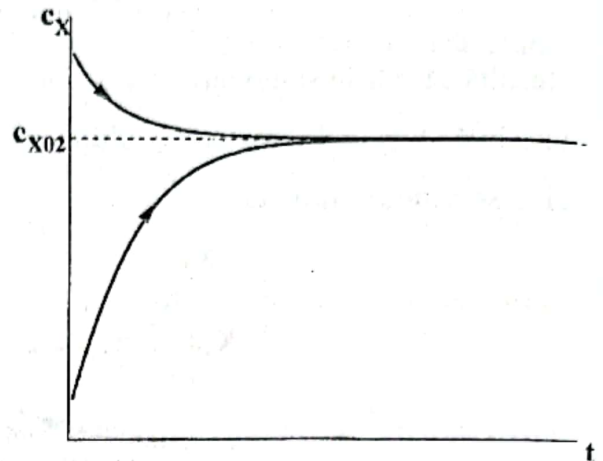


Fig. 3.2 b

a) Ecuația de evoluție a concentrației intermediarului X este

$$\frac{dc_X}{dt} = k_1^+ c_A c_X - k_1^- c_X^2 \quad (3.19)$$

Impunînd condiția de punct fix, se obțin stările staționare

$$c_{X01} = 0; c_{X02} = \frac{k_1^+ c_A}{k_1^-} \quad (3.20)$$

Din (3.19), rezultă că valoarea proprie este

$$\omega = k_1^+ c_A - 2k_1^- c_{X0} \quad (3.21)$$

Înlocuind (3.20) în (3.21) se obține

$$\omega_1 = k_1^+ c_A > 0; \omega_2 = -k_1^+ c_A < 0 \quad (3.22)$$

Rezultă că starea staționară 1, în care concentrația intermediarului este nulă, este instabilă. Traectoriile diverg din vecinătatea acesteia și converg către starea staționară 2, care este stabilă (fig. 3.2 a). Reacțiile autocatalitice conduc la apariția instabilităților dinamice. O discuție termodinamică a acestui subiect este prezentată în [1].

b) Ecuația de evoluție a concentrației intermediarului X este

$$\frac{dc_X}{dt} = k_1^+ c_A c_X - k_1^- c_X^2 - k_2^+ c_X + k_2^- c_B \quad (3.23)$$

Impunînd condiția de punct fix, se obțin stările staționare

$$c_{X01} = \frac{-k_2^+ + k_1^+ c_A - \sqrt{(k_2^+ - k_1^+ c_A)^2 + 4k_1^- k_2^- c_B}}{2k_1^-};$$

$$c_{X02} = \frac{-k_2^+ + k_1^+ c_A + \sqrt{(k_2^+ - k_1^+ c_A)^2 + 4k_1^- k_2^- c_B}}{2k_1^-} \quad (3.24)$$

Starea staționară 1 corespunde unei concentrații negative, ceea ce nu are sens fizic. Sistemul posedă o singură stare staționară, 2. Valoarea proprie, în acord cu (3.23), este

$$\omega_2 = k_1^+ c_A - 2k_1^- c_{X02} - k_2^+$$

Înlocuind (3.24) în această expresie, se obține că

$$\omega_2 = -\sqrt{(k_2^+ - k_1^+ c_A)^2 + 4k_1^- k_2^- c_B} < 0$$

Starea staționară 2 este stabilă. Toate traiectoriile fazice converg către aceasta (fig. 3.2

b). Rezultă că apariția celei de-a doua reacții elementare, care nu este autocatalitică, a anulat efectul destabilizator al reacției elementare autocatalitice.

Aplicația 3.3

Determinați stările staționare, studiați stabilitatea acestora și trasați portretul fazelor pentru următoarele sisteme bidimensionale liniare [3,10]:

$$a) \begin{cases} \dot{x}_1 = x_1 - 2x_2 \\ \dot{x}_2 = 3x_1 - 4x_2 \end{cases} \quad (3.25)$$

$$b) \begin{cases} \dot{x}_1 = 2x_1 + 2x_2 \\ \dot{x}_2 = -2x_1 - 3x_2 \end{cases} \quad (3.26)$$

$$c) \begin{cases} \dot{x}_1 = 3x_1 + x_2 \\ \dot{x}_2 = 3x_2 \end{cases} \quad (3.27)$$

Rezolvare

Pentru sistemele bidimensionale, ecuațiile liniarizate de evoluție, (3.6), satisfăcute de către perturbațiile x_1 și x_2 , au forma

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 \\ \frac{dx_2}{dt} = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 \end{cases} \quad (3.28)$$

iar problema de vectori și valori proprii (3.9) se scrie

$$\begin{cases} (a_{11} - \omega_i)u_{i1} + a_{12}u_{i2} = 0 \\ a_{21}u_{i1} + (a_{22} - \omega_i)u_{i2} = 0 \end{cases} \quad i = 1, 2 \quad (3.29)$$

Aici, u_{i1} și u_{i2} sînt cele două componente ale vectorului propriu $\vec{u}_i$, asociat valorii proprii ω_i . Soluția generală a sistemului (3.28) este o suprapunere liniară a soluțiilor de forma (3.8)

$$\vec{x} = c_1 \vec{u}_1 e^{\omega_1 t} + c_2 \vec{u}_2 e^{\omega_2 t} \quad (3.30)$$

Pentru un sistem bidimensional, aceasta se scrie

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = c_1 \begin{pmatrix} u_{11} \\ u_{12} \end{pmatrix} e^{\omega_1 t} + c_2 \begin{pmatrix} u_{21} \\ u_{22} \end{pmatrix} e^{\omega_2 t}$$

care este tot una cu

$$\begin{cases} x_1 = c_1 u_{11} e^{\omega_1 t} + c_2 u_{21} e^{\omega_2 t} \\ x_2 = c_1 u_{12} e^{\omega_1 t} + c_2 u_{22} e^{\omega_2 t} \end{cases} \quad (3.31)$$

Ecuția caracteristică (3.10) are forma

$$\begin{vmatrix} a_{11} - \omega & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (3.32)$$

de unde

$$\omega^2 - T\omega + \Delta = 0 \quad (3.33)$$

unde T și Δ sînt trasa, respectiv determinantul matricei Jacobiene A

$$\begin{cases} T = a_{11} + a_{22} \\ \Delta = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \end{cases}$$

Soluțiile ecuației caracteristice (3.33) sînt

$$\omega_{1,2} = \frac{T \pm (T^2 - 4\Delta)^{1/2}}{2} = \frac{T \pm D^{1/2}}{2} \quad (3.34)$$

Figura 3.3 sintetizează situațiile care apar, în funcție de valorile parametrilor T și Δ .

- pentru *nodul instabil*, ambele valori proprii sînt pozitive. Traectoriile fazice diverg monoton din punctul fix și, cel mai adesea, tind la un nou atractor.
- pentru *focarul instabil*, ambele valori proprii sînt complexe, cu partea reală pozitivă.

Traietoriile fazice diverg oscilant din punctul fix și, cel mai adesea, tind la un nou atractor, care este, de obicei, un ciclu limită.

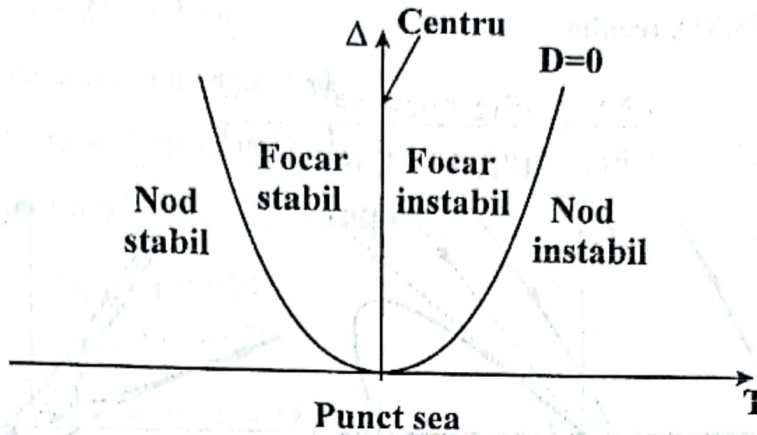


Fig. 3.3

- pentru *focarul stabil*, ambele valori proprii sînt complexe, cu partea reală negativă. Acest fapt asigură stabilitatea punctului fix. Traietoriile fazice converg oscilant către punctul fix.
- pentru *nodul stabil*, ambele valori proprii sînt negative. Traietoriile fazice converg monoton către punctul fix.
- pentru *punctul șea*, o valoare proprie este negativă și cealaltă este pozitivă. De-a lungul unei direcții a spațiului fazic traietoriile converg și de-a lungul altei direcții traietoriile diverg. Datorită acestei divergențe, starea staționară este instabilă și, cel mai adesea, traietoriile tind la un nou atractor.

În marea majoritate a sistemelor fizice, divergența traietoriilor la infinit este exclusă, deoarece nu are semnificație fizică. Dacă apare, această divergență se mai numește și *comportament exploziv*.

a) Sistemul (3.25) admite starea staționară ($x_1 = 0, x_2 = 0$). Pentru acest sistem, ecuația caracteristică (3.32) devine

$$\begin{vmatrix} 1 - \omega & -2 \\ 3 & -4 - \omega \end{vmatrix} = 0$$

care are ambele rădăcini negative,

$$\omega_2 = -2 \text{ și } \omega_1 = -1. \quad (3.35)$$

Înlocuind valorile proprii ω_i în (3.29), se obține că

$$\begin{cases} u_{12}/u_{11} = 1 \\ u_{22}/u_{21} = 3/2 \end{cases} \quad (3.36)$$

Din ecuația (3.31), rezultă

$$\frac{x_2}{x_1} = \frac{c_1 u_{12} + c_2 u_{22} e^{(\omega_2 - \omega_1)t}}{c_1 u_{11} + c_2 u_{21} e^{(\omega_2 - \omega_1)t}} \quad (3.37)$$

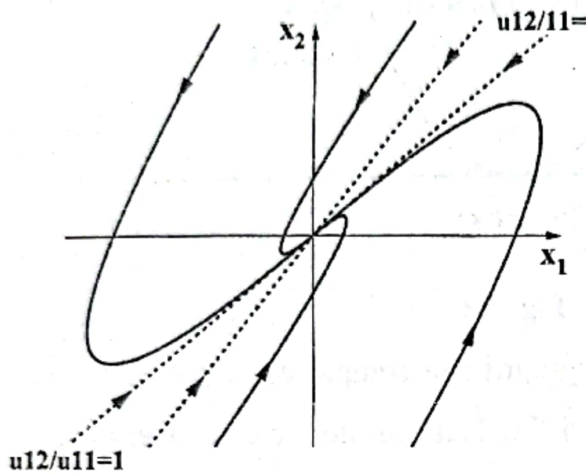


Fig. 3.4

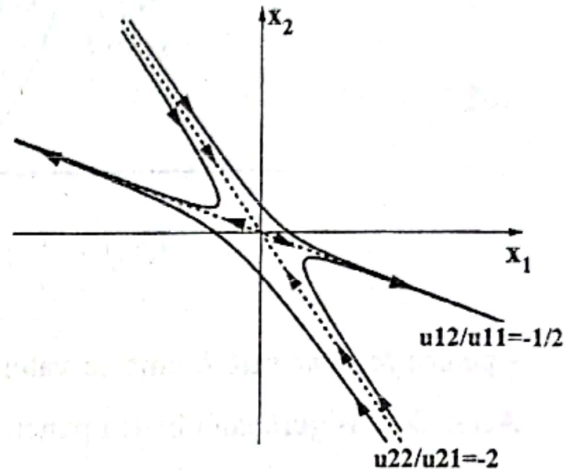


Fig. 3.5

Considerăm următoarele cazuri limită:

- pentru $c_1 = 0$, (3.37) se reduce la

$$\frac{x_2}{x_1} = \frac{u_{22}}{u_{21}} \quad (3.38)$$

În acord cu (3.36), aceasta reprezintă ecuația unei drepte care trece prin origine.

- pentru $c_2 = 0$, (3.37) se reduce la

$$\frac{x_2}{x_1} = \frac{u_{12}}{u_{11}} \quad (3.39)$$

În acord cu (3.36), aceasta reprezintă de asemenea ecuația unei drepte care trece prin origine. Deoarece valorile proprii sînt negative, dacă punctul fazic reprezentativ se află pe una dintre aceste drepte, el se va deplasa asimptotic către origine (fig. 3.4).

Pentru $c_1 \neq 0$ și $c_2 \neq 0$, condiția inițială nu se află pe una dintre cele două linii. Deoarece valorile proprii sînt negative, punctul fazic reprezentativ se deplasează, de-a lungul unei curbe, și tinde asimptotic către origine (fig. 3.4). Starea staționară constituie un nod stabil.

b) Sistemul (3.26) admite starea staționară ($x_1 = 0, x_2 = 0$). Pentru acest sistem,

ecuația caracteristică (3.32) devine

$$\begin{vmatrix} 2-\omega & 2 \\ -2 & -3-\omega \end{vmatrix} = 0$$

care are o rădăcină negativă și una pozitivă

$$\omega_2 = -2 \text{ și } \omega_1 = 1 \quad (3.40)$$

Înlocuind valorile proprii ω_i în (3.29), se obține că

$$\begin{cases} u_{12}/u_{11} = -1/2 \\ u_{22}/u_{21} = -2 \end{cases} \quad (3.41)$$

În cazul particular $c_1 = 0$, ecuația (3.31) devine

$$\begin{cases} x_1 = c_2 u_{21} e^{\omega_2 t} \\ x_2 = c_2 u_{22} e^{\omega_2 t} \end{cases}$$

Facînd raportul acestora, se obține ecuația unei drepte,

$$x_2 = \frac{u_{22}}{u_{21}} x_1$$

Deoarece $\omega_2 < 0$, dacă condiția inițială se află pe dreaptă, punctul fazic va tinde asimptotic, de-a lungul drepte, către origine. Spunem că această dreaptă constituie *subspațiul stabil al punctului fix*. Dacă $c_2 = 0$, din ecuația (3.31) se obține

$$\begin{cases} x_1 = c_1 u_{11} e^{\omega_1 t} \\ x_2 = c_1 u_{12} e^{\omega_1 t} \end{cases}$$

Facînd raportul acestora, se obține ecuația unei drepte,

$$x_2 = \frac{u_{12}}{u_{11}} x_1$$

Deoarece $\omega_1 > 0$, dacă condiția inițială se află pe dreaptă, punctul fazic va diverge, de-a lungul drepte, în raport cu originea. Spunem că această dreaptă constituie *subspațiul instabil al punctului fix*. Cele patru semidrepte care pleacă din origine divid planul fazic în patru și se numesc *separatoare*. Punctul fix se numește, în acest caz, punct șea. Aspectul general al traiectoriilor fazice este reprezentat în fig. 3.5.

c) Sistemul (3.27) admite starea staționară ($x_1 = 0, x_2 = 0$). Ecuația caracteristică este

$$\begin{vmatrix} 3-\omega & 1 \\ 0 & 3-\omega \end{vmatrix} = 0$$

care are rădăcină dublă,

$$\omega_1 = \omega_2 = 3$$

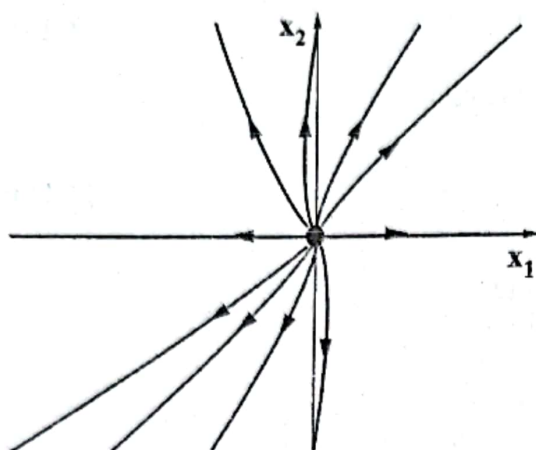


Fig. 3.6

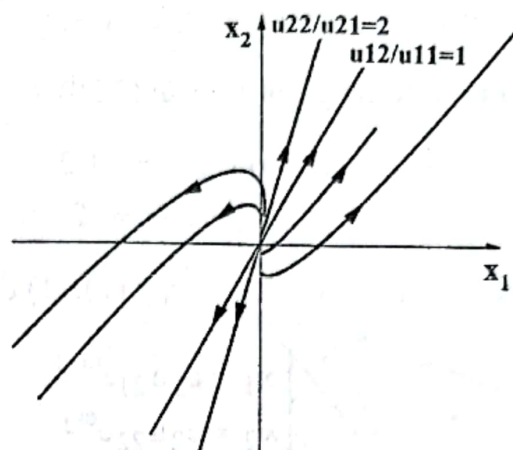


Fig. 3.7

Din ecuația (3.29) rezultă că vectorii proprii satisfac

$$\frac{u_{12}}{u_{11}} = 0$$

Sistemul are un singur vector propriu, de-a lungul axei x_1 . Starea staționară este un nod instabil (fig. 3.6). Toate traiectoriile fazice diverg la infinit.

Aplicația 3.4

Considerăm ecuațiile de evoluție [5]

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = 4x_1 - x_2 \\ \dot{x}_2 = 2x_1 + x_2 \end{cases} \quad (3.42)$$

Studiați stabilitatea stării staționare. Trasați portretul fazelor în vecinătatea originii. Găsiți soluția corespunzătoare condiției inițiale $(x_1, x_2) = (3, 4)$.

Rezolvare

Sistemul (3.42) admite originea axelor de coordonate ca punct fix. Ecuația caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} 4-\omega & -1 \\ 2 & 1-\omega \end{vmatrix} = 0$$

care are rădăcinile $\omega_1 = 3$ și $\omega_2 = 2$. Punctul fix este un nod instabil. Înlocuind

valorile proprii în (3.29), se obțin vectorii proprii corespunzători,

$$\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \text{ și } \vec{u}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Fig. 3.7 prezintă portretul fazelor în vecinătatea punctului fix. Traectoriile fazice diverg monoton în raport cu punctul fix.

Soluția generală a ecuațiilor de evoluție (3.42) este de forma (3.31). Înlocuind în sistemul (3.31) vectorii și valorile proprii, se obține că

$$\begin{cases} x_1 = c_1 e^{3t} + c_2 e^{2t} \\ x_2 = c_1 e^{3t} + 2c_2 e^{2t} \end{cases} \quad (3.43)$$

Impunând ca soluția să satisfacă condiția inițială $(x_1, x_2) = (3, 4)$, se obține

$$\begin{cases} c_1 = 2 \\ c_2 = 1 \end{cases} \quad (3.44)$$

Înlocuind (3.44) în (3.43), se găsește soluția particulară

$$\begin{cases} x_1 = 2e^{3t} + e^{2t} \\ x_2 = 2e^{3t} + 2e^{2t} \end{cases}$$

Aplicația 3.5

Determinați stările staționare și studiați stabilitatea acestora pentru următoarele sisteme bidimensionale:

a) Oscilatorul liniar armonic, descris de ecuațiile de evoluție (2.5)

$$\begin{cases} \dot{x} = v \\ \dot{v} = -\omega_0^2 x \end{cases}$$

b) Oscilatorul van der Pol, descris de ecuațiile (2.10)

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = \mu(1 - x^2)y - x \end{cases}$$

unde $\mu > 0$ este un parametru real,

c) Următoarele ecuații de evoluție de la aplicația 2.3:

$$c1) \quad \dot{x} = x; \dot{y} = 2y; \quad (2.44)$$

$$c2) \quad \dot{x} = -3x; \dot{y} = -2y; \quad (2.45)$$

$$c3) \dot{x} = -x + y; \dot{y} = -x - y; \quad (2.46)$$

Rezolvare

a) Oscilatorul liniar armonic admite starea staționară ($x = 0; v = 0$), care corespunde poziției de echilibru. Ținând cont de ecuațiile de evoluție (2.5), ecuația caracteristică (3.32) ia forma

$$\begin{vmatrix} -\omega & 1 \\ -\omega_0^2 & -\omega \end{vmatrix} = 0 \quad (3.45)$$

de unde, valorile proprii sînt

$$\omega_{1,2} = \pm i\omega_0 \quad (3.46)$$

Starea staționară este un centru. Datorită faptului că partea reală a valorii proprii este nulă, stabilitatea este marginală. Mișcarea este periodică și sistemul admite o infinitate de orbite eliptice (fig. 2.1) ce înconjoară starea staționară.

b) Oscilatorul van der Pol admite starea staționară ($x = 0; y = 0$), care corespunde poziției de echilibru. Ținând cont de ecuațiile de evoluție (2.10), ecuația caracteristică (3.32) ia forma

$$\begin{vmatrix} -\omega & 1 \\ -1 & \mu - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (3.47)$$

În funcție de valoarea parametrului de control μ , sînt posibile următoarele situații:

$$i) \mu \in (0, 2) \Rightarrow \omega_{1,2} = \frac{\mu}{2} \pm i \frac{\sqrt{4 - \mu^2}}{2}$$

Valorile proprii sînt complexe. Deoarece partea reală a acestora este pozitivă, starea staționară este instabilă (focar instabil). Datorită părții imaginare, traiectoria fazică (curba continuă în fig. 3.8) oscilează în jurul stării staționare, pînă atinge ciclul limită.

$$ii) \mu > 2 \Rightarrow \omega_{1,2} = \frac{\mu \pm \sqrt{\mu^2 - 4}}{2} > 0$$

Deoarece ambele valori proprii sînt pozitive, starea staționară este un nod instabil. Traiectoria fazică (linia întreruptă în fig. 3.8) părăsește rapid punctul fix și, în acest caz, tinde tot la un ciclu limită.

c1) Ecuațiile de evoluție (2.44) admit punctul fix ($x = 0; y = 0$). Ecuația caracteristică (3.32) ia forma

$$\begin{vmatrix} 1-\omega & 0 \\ 0 & 2-\omega \end{vmatrix} = 0$$

Valorile proprii sînt ambele pozitive,

$$\begin{cases} \omega_1 = 1 \\ \omega_2 = 2 \end{cases}$$

Starea staționară este un nod instabil (fig. 2.11 a). Traietoriile fazice diverg din punctul fix.

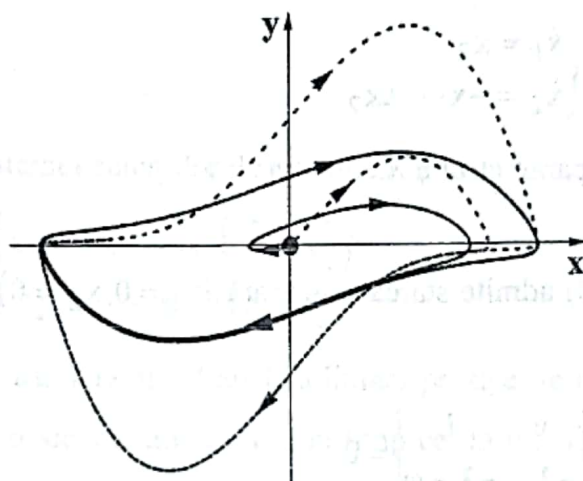


Fig. 3.8

c2) Ecuațiile de evoluție (2.45) admit punctul fix ($x = 0; y = 0$). Ecuația caracteristică (3.32) ia forma

$$\begin{vmatrix} -3-\omega & 0 \\ 0 & -2-\omega \end{vmatrix} = 0$$

Valorile proprii sînt ambele negative

$$\begin{cases} \omega_1 = -2 \\ \omega_2 = -3 \end{cases}$$

Starea staționară este un nod stabil (fig. 2.11 b). Traietoriile fazice converg către punctul fix.

c3) Ecuațiile de evoluție (2.46) admit punctul fix ($x = 0; y = 0$). Ecuația caracteristică (3.32) ia forma

$$\begin{vmatrix} -1-\omega & 1 \\ -1 & -1-\omega \end{vmatrix} = 0$$

Valorile proprii sînt complexe, cu parte reală negativă

$$\begin{cases} \omega_1 = -1 + i \\ \omega_2 = -1 - i \end{cases}$$

Starea staționară este un focar stabil (fig. 2.11 c). Traiectoriile fazice converg oscilant către punctul fix.

Aplicația 3.6

Discutați stabilitatea stării staționare a sistemului [11]

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = -x_1 - \lambda x_2 \end{cases} \quad (3.48)$$

pentru toate valorile parametrului λ .

Rezolvare

Sistemul (3.48) admite starea staționară ($x_1 = 0, x_2 = 0$). Ecuația caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} -\omega & 1 \\ -1 & -\lambda - \omega \end{vmatrix} = 0$$

de unde

$$\omega^2 + \lambda\omega + 1 = 0 \quad (3.49)$$

Discriminantul ecuației (3.49) este

$$D = \lambda^2 - 4 \quad (3.50)$$

Suma valorilor proprii este

$$\omega_1 + \omega_2 = -\lambda \quad (3.51)$$

iar produsul acestora este

$$\omega_1\omega_2 = 1 \quad (3.52)$$

Ca urmare, dacă valorile proprii sînt reale, ele au același semn. În acord cu ecuațiile (3.50)-(3.52), sînt posibile situațiile:

a) $\lambda \leq -2$. Valorile proprii asociate stării staționare ($x_1 = 0, x_2 = 0$) sînt reale și pozitive. Starea staționară este un nod instabil. Traiectoriile fazice se îndepărtează monoton de punctul fix.

b) $\lambda \in (-2, 0)$. Valorile proprii sînt complexe, cu partea reală pozitivă. Starea staționară este un focar instabil. Traiectoriile fazice se îndepărtează oscilant de punctul

fix.

c) $\lambda \in [0, 2)$. Valorile proprii sînt complexe, cu partea reală negativă. Starea staționară este un focar stabil. Traectoriile fazice converg oscilant către punctul fix.

d) $\lambda \in [2, \infty)$. Valorile proprii sînt reale și negative. Starea staționară este un nod stabil. Traectoriile fazice converg monoton către punctul fix.

La creșterea lui λ , sistemul se deplasează, în semiplanul superior al fig. 3.3, paralel cu abscisa, în sensul scăderii lui T .

Aplicația 3.7

Considerăm sistemul ecuațiilor de evoluție [5]

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -x_2 + ax_1(x_1^2 + x_2^2) \\ \dot{x}_2 = x_1 + ax_2(x_1^2 + x_2^2) \end{cases} \quad (3.53)$$

unde a este un parametru. Arătați că analiza liniară prezice, în mod greșit, că originea este un centru pentru orice valoare a lui a , în timp ce, în realitate, originea este focar stabil dacă $a < 0$ și instabil dacă $a > 0$.

Rezolvare

Originea este punct fix al sistemului (3.53). Ecuația caracteristică este

$$\begin{vmatrix} -\omega & -1 \\ 1 & -\omega \end{vmatrix} = 0$$

și are rădăcinile $\omega_{1,2} = \pm i$. Deoarece valorile proprii sînt pur imaginare, punctul fix are stabilitate marginală și este un centru.

Pentru a găsi dinamica reală descrisă de ecuațiile (3.53), căutăm soluția analitică a acestui sistem. Trecem la coordonate polare plane, cu ajutorul transformării

$$\begin{cases} x_1 = \rho \cos \theta \\ x_2 = \rho \sin \theta \end{cases} \quad (3.54)$$

Înlocuind (3.54) în ecuațiile de evoluție (3.53), se obține

$$\begin{cases} \dot{\rho} \cos \theta - \rho \dot{\theta} \sin \theta = -\rho \sin \theta + a\rho^3 \cos \theta \\ \dot{\rho} \sin \theta + \rho \dot{\theta} \cos \theta = \rho \cos \theta + a\rho^3 \sin \theta \end{cases} \quad (3.55)$$

Înmulțim prima ecuație cu $-\sin \theta$, a doua cu $\cos \theta$ și le adunăm. Se obține ecuația de evoluție pentru coordonata angulară

$$\dot{\theta} = 1 \quad (3.56)$$

Toate traiectoriile fazice se rotesc în jurul originii cu viteză unghiulară constantă. Înlocuind (3.56) în una din ecuațiile (3.55), se obține ecuația de evoluție pentru rază

$$\dot{\rho} = a\rho^3 \quad (3.57)$$

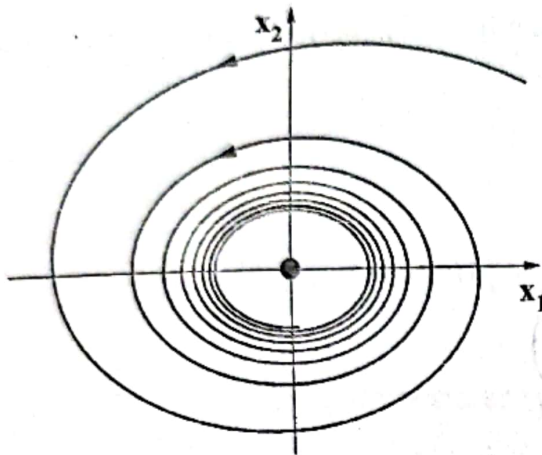


Fig. 3.9 a

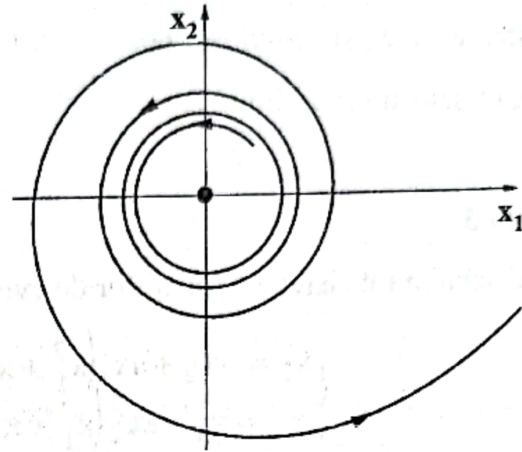


Fig. 3.9 b

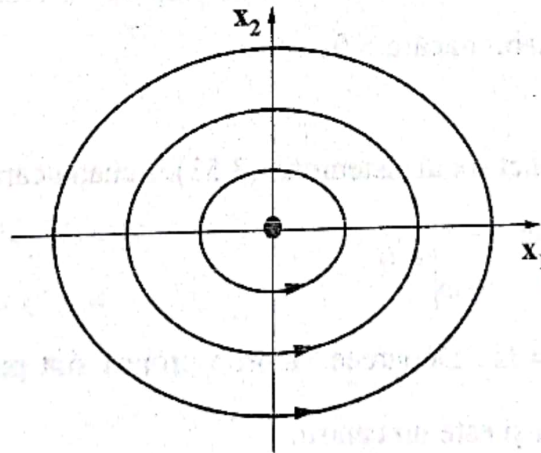


Fig. 3.9 c

Traectoria fazică converge după o spirală către origine când $a < 0$ (fig. 3.9 a) și diverge în raport cu originea când $a > 0$ (fig. 3.9 b). În cazul $a = 0$, originea este un centru (fig. 3.9 c).

Aplicația 3.8

Considerăm ecuațiile de evoluție [5]

$$a) \begin{cases} \dot{x} = x - y \\ \dot{y} = x^2 - 4 \end{cases} \quad (3.58)$$

$$b) \begin{cases} \dot{x} = 1 + y - e^{-x} \\ \dot{y} = x^3 - y \end{cases} \quad (3.59)$$

$$c) \begin{cases} \dot{x} = y + x - x^3 \\ \dot{y} = -y \end{cases} \quad (3.60)$$

$$d) \begin{cases} \dot{x} = xy - 1 \\ \dot{y} = x - y^3 \end{cases} \quad (3.61)$$

Determinați stările staționare ale acestor sisteme și realizați analiza liniară de stabilitate a acestora.

Rezolvare

a) Sistemul (3.58) admite două stări staționare

$$\begin{cases} x = -2 \\ y = -2 \end{cases} \text{ și } \begin{cases} x = 2 \\ y = 2 \end{cases}$$

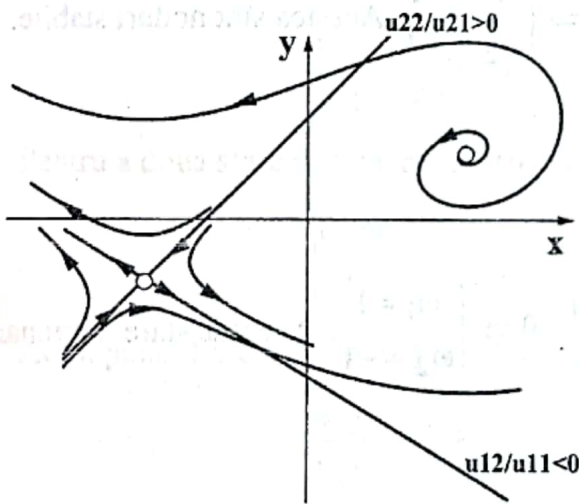


Fig. 3.10

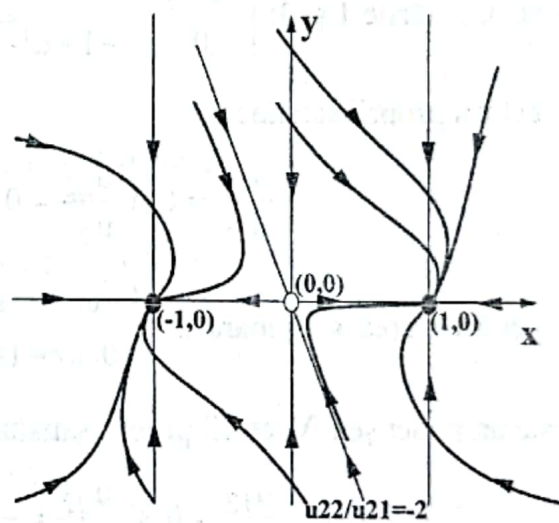


Fig. 3.11

Pentru prima stare staționară, ecuația caracteristică este

$$\begin{vmatrix} 1 - \omega & -1 \\ -4 & -\omega \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \omega_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{17}}{2}$$

Starea staționară $(-2, -2)$ este un punct șea (fig. 3.10). Vectorii proprii satisfac:

$$\frac{u_{12}}{u_{11}} = \frac{1 - \sqrt{17}}{2} < 0 \text{ și } \frac{u_{22}}{u_{21}} = \frac{1 + \sqrt{17}}{2} > 0$$

Pentru a doua stare staționară, ecuația caracteristică este

$$\begin{vmatrix} 1-\omega & -1 \\ 4 & -\omega \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \omega_{1,2} = \frac{1 \pm i\sqrt{15}}{2}$$

Această stare staționară este un focar instabil.

b) Sistemul (3.59) admite ca punct fix numai originea planului fazic. Ecuația caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} 1-\omega & 1 \\ 0 & -1-\omega \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 = 1 \\ \omega_2 = -1 \end{cases}$$

Punctul fix este un punct șea.

c) Sistemul (3.60) admite trei stări staționare (fig. 3.11)

$$\begin{cases} x = -1 \\ y = 0 \end{cases}; \begin{cases} x = 0 \\ y = 0 \end{cases} \text{ și } \begin{cases} x = 1 \\ y = 0 \end{cases}$$

Ecuațiile caracteristice sînt

- pentru stările 1 și 3: $\begin{vmatrix} -2-\omega & 1 \\ 0 & -1-\omega \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 = -1 \\ \omega_2 = -2 \end{cases}$. Acestea sînt noduri stabile.

Vectorii proprii satisfac

$$\frac{u_{12}}{u_{11}} = 1 \text{ și } \frac{u_{22}}{u_{21}} = 0$$

- pentru starea staționară 2: $\begin{vmatrix} 1-\omega & 1 \\ 0 & -1-\omega \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 = 1 \\ \omega_2 = -1 \end{cases}$. Această stare staționară

este un punct șea. Vectorii proprii satisfac

$$\frac{u_{12}}{u_{11}} = 0 \text{ și } \frac{u_{22}}{u_{21}} = -2$$

d) Sistemul de ecuații (3.61) admite două puncte fixe

$$\begin{cases} x = -1 \\ y = -1 \end{cases} \text{ și } \begin{cases} x = 1 \\ y = 1 \end{cases}$$

Ecuația caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} y_0 - \omega & x_0 \\ 1 & -3y_0^2 - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (3.62)$$

Pentru prima stare staționară, ecuația (3.62) devine

$$\begin{vmatrix} -1-\omega & -1 \\ 1 & -3-\omega \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \omega_1 = \omega_2 = -2$$

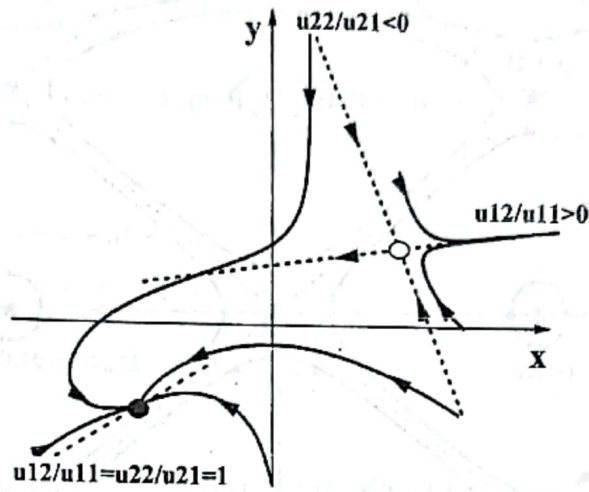


Fig. 3.12

Starea staționară $(-1, -1)$ este un nod stabil (fig. 3.12). Vectorii proprii satisfac

$$\frac{u_{12}}{u_{11}} = \frac{u_{22}}{u_{21}} = 1$$

Pentru a doua stare staționară, ecuația caracteristică devine

$$\begin{vmatrix} 1-\omega & 1 \\ 1 & -3-\omega \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \omega_{1,2} = -1 \pm \sqrt{5}$$

Acest punct fix este un punct șea. Vectorii proprii satisfac

$$\frac{u_{12}}{u_{11}} = -2 + \sqrt{5} > 0 \text{ și } \frac{u_{22}}{u_{21}} = -2 - \sqrt{5} < 0$$

Aplicația 3.9

Considerăm ecuațiile de evoluție [12]

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -x_2 + x_2^3 \\ \dot{x}_2 = -x_1 + x_1^3 \end{cases} \quad (3.63)$$

Determinați stările staționare ale sistemului și realizați analiza liniară de stabilitate.

Trasați portretul fazelor.

Rezolvare

Sistemul (3.63) admite următoarele puncte fixe:

$$(0,0), (0,1), (0,-1), (1,0), (-1,0), (1,1), (1,-1), (-1,1) \text{ și } (-1,-1) \quad (3.64)$$

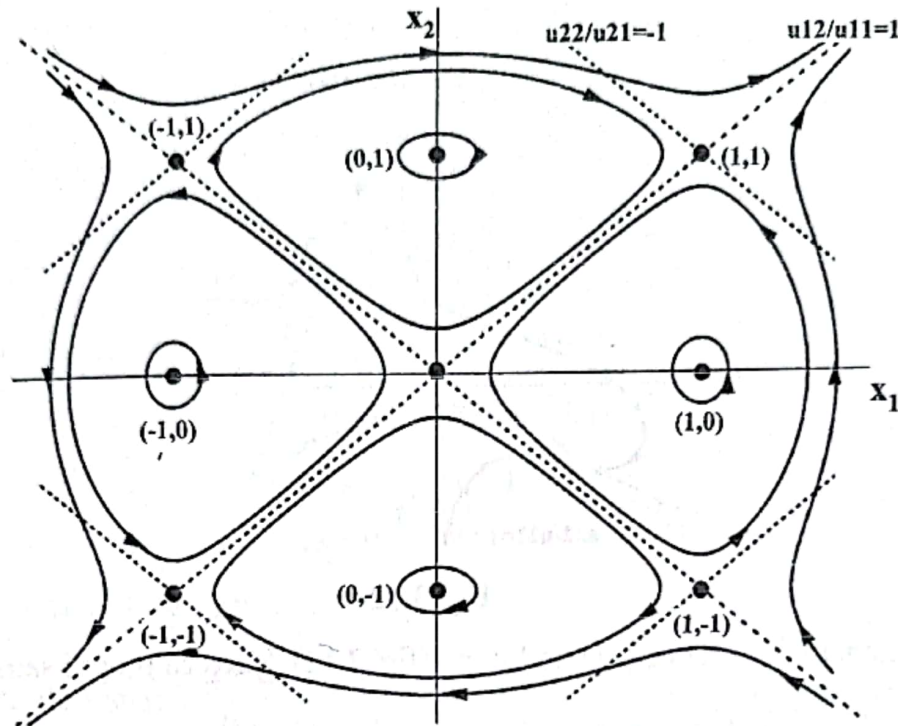


Fig. 3.13

Ecuția caracteristică asociată sistemului (3.63) este

$$\begin{vmatrix} -\omega & -1+3x_{20}^2 \\ -1+3x_{10}^2 & -\omega \end{vmatrix} = 0 \quad (3.65)$$

În consecință, valorile proprii satisfac

$$\omega^2 = (3x_{20}^2 - 1)(3x_{10}^2 - 1) \quad (3.66)$$

Mai jos sînt date valorile proprii asociate punctelor fixe (3.64):

- pentru starea staționară $(0,0) \Rightarrow \omega_1 = -1, \omega_2 = 1$; originea este un punct șea. Vectorii proprii satisfac:

$$\frac{u_{12}}{u_{11}} = 1; \frac{u_{22}}{u_{21}} = -1 \quad (3.67)$$

deci sînt orientați după bisectoarele axelor de coordonate.

- pentru stările staționare $(1,1), (1,-1), (-1,1), (-1,-1) \Rightarrow \omega_1 = -2, \omega_2 = 2$. Aceste stări staționare sînt puncte șea. Vectorii proprii satisfac relația (3.67).

- pentru stările staționare $(0,1), (0,-1), (1,0), (-1,0) \Rightarrow \omega_{1,2} = \pm i\sqrt{2}$. Aceste stări staționare sînt centre.

Portretul fazelor este reprezentat în fig. 3.13. Așa cum este de așteptat, analiza liniară de stabilitate face predicții corecte doar în vecinătatea punctelor fixe.

Aplicația 3.10

În anumite situații, glicoliza poate avea loc oscilant. Un model care descrie aceste oscilații este [5]

$$\begin{cases} \dot{x} = -x + ay + x^2y \\ \dot{y} = b - ay - x^2y \end{cases} \quad (3.68)$$

Găsiți condiția ca starea staționară să fie focar instabil.

Rezolvare

Sistemul descris de ecuațiile (3.68) admite starea staționară

$$\begin{cases} x_0 = b \\ y_0 = \frac{b}{a+b^2} \end{cases} \quad (3.69)$$

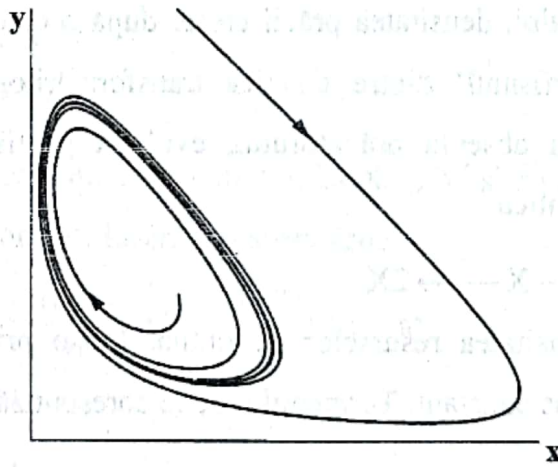


Fig. 3.14

Ecuația caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} -1 + 2x_0y_0 - \omega & a + x_0^2 \\ -2x_0y_0 & -\left(a + x_0^2\right) - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (3.70)$$

Determinantul matricei Jacobiene este

$$\Delta = a + b^2 > 0$$

iar trasa acestuia este

$$T = -\frac{b^4 + (2a-1)b^2 + (a+a^2)}{a+b^2} \quad (3.71)$$

În acord cu Fig. 3.3, starea staționară este un focar stabil pentru $T < 0$ și instabil pentru $T > 0$. Trecerea de la stabilitate la instabilitate se realizează pentru $T = 0$. În acord cu (3.71), aceasta conduce la

$$b_{1,2}^2 = \frac{1}{2}(1 - 2a \pm \sqrt{1 - 8a}) \quad (3.72)$$

Între aceste valori, sistemul admite un comportament periodic de tip ciclu limită (fig. 3.14).

3.2 Modele pradă-prădător: sisteme Lotka-Volterra. Analiza în planul fazelor cu ajutorul nulclinelor

Considerăm un cuplu pradă-prădător; notăm cu X densitatea de populație a prăzii și cu Y densitatea de populație a prădătorului. Se fac următoarele presupuneri:

a) în absența prădătorului, densitatea prăzii crește după o cinetică liniară. Acest fapt este legat de 'izomorfismul' dintre cinetica transformărilor biologice și cinetica proceselor chimice. În absența prădătorului, evoluția prăzii poate fi descrisă de transformarea autocatalitică



unde A reprezintă densitatea resurselor de hrană. Într-o primă aproximație, acest termen poate fi presupus constant. Termenul cinetic corespunzător transformării (3.73) este de forma

$$\frac{dX}{dt} \sim AX$$

b) Efectul prădătorului este de a reduce densitatea prăzii. Ca urmare, densitatea prădătorului crește. În ecuațiile cinetice, acești termeni sînt proporționali cu produsul XY , deoarece transformarea este de forma



c) În absența prăzii, prădătorul dispare după o lege exponențială în timp. Dispariția prădătorului poate fi descrisă de transformarea



iar termenul cinetic este de forma

$$\frac{dY}{dt} \sim -Y$$

Cu aceste presupuneri, ecuațiile cinetice de evoluție ale acestui model, numit Lotka-Volterra (L-V) [13] sînt de forma

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = X(a - bY) \\ \frac{dY}{dt} = Y(cX - d) \end{cases} \quad (3.74)$$

unde a , b , c și d sînt constante pozitive.

O metodă des utilizată în studiul sistemelor dinamice este *adimensionalizarea*. În cazul ecuațiilor (3.74), variabilele dinamice sînt X și Y , care sînt funcții de timpul t . Trecerea la variabile adimensionale se face cu ajutorul unor transformări de forma

$$\begin{cases} \tau = t/t^* \\ u = X/X^* \\ v = Y/Y^* \end{cases} \quad (3.75)$$

unde t^* este un *timp caracteristic* al sistemului, iar X^* și Y^* sînt valori caracteristice ale densității de populație. Concret, facem transformările

$$u(\tau) = \frac{cX(t)}{d}; \quad v(\tau) = \frac{bY(t)}{a}; \quad \tau = at \quad (3.76)$$

și notăm

$$\alpha = d/a \quad (3.77)$$

Avantajele adimensionalizării sînt:

- reducerea numărului de parametri și în consecință simplificarea ecuațiilor de evoluție;
- obținerea unor variabile care sînt, în cazul în care adimensionalizarea a fost făcută corect, de ordinul unității. Acest fapt este extrem de important dacă ecuațiile de evoluție adimensionale sînt rezolvate numeric.

Introducînd (3.76) în (3.74), se obține

$$\begin{cases} \frac{du}{d\tau} = u(1-v) = F_u(u, v) \\ \frac{dv}{d\tau} = \alpha v(u-1) = F_v(u, v) \end{cases} \quad (3.78)$$

Ecuațiile (3.78) admit două stări staționare:

- a) $u = v = 0$, care nu prezintă interes practic – atât prada cât și prădătorul sînt absenți;
- b) $u = v = 1$.

Ecuația caracteristică (3.32) are forma

$$\begin{vmatrix} 1 - v_0 - \omega & -u_0 \\ \alpha v_0 & \alpha(u_0 - 1) - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (3.79)$$

Pentru starea staționară (b), aceasta se reduce la

$$\begin{vmatrix} -\omega & -1 \\ \alpha & -\omega \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \omega^2 + \alpha = 0 \quad (3.80)$$

Aceasta are soluțiile

$$\omega_{1,2} = \pm i\sqrt{\alpha} \quad (3.81)$$

Valorile proprii fiind pur imaginare, sistemul prezintă stabilitate marginală. Dinamica este oscilantă (fig. 3.15 a).

3.2.1. Proprietăți ale sistemului Lotka-Volterra

a) Sistemul este conservativ.

Demonstrăm această proprietate pentru traiectorii apropiate de starea staționară. Deoarece valorile proprii sînt pur imaginare, soluția perturbată, (3.12), are forma

$$\begin{cases} u = u_0 + u_1 e^{i\omega_1 t} \\ v = v_0 + v_1 e^{i\omega_1 t} \end{cases} \quad (3.82)$$

Divergența membrului drept din ecuațiile de evoluție (3.78) este

$$\nabla \cdot \vec{F} = \frac{\partial F_u}{\partial u} + \frac{\partial F_v}{\partial v} = 1 - v + \alpha(u - 1) \quad (3.83)$$

Înlocuind (3.82) în (3.83), se obține

$$\nabla \cdot \vec{F} = (\alpha u_1 - v_1) e^{i\omega_1 t} \quad (3.84)$$

Deoarece exponențiala cu exponent pur imaginar este periodică, media sa în raport cu timpul este zero. Ca urmare, condiția ca sistemul să fie conservativ, (2.20), este

satisfăcută

$$(\nabla \cdot \vec{F})_t = 0$$

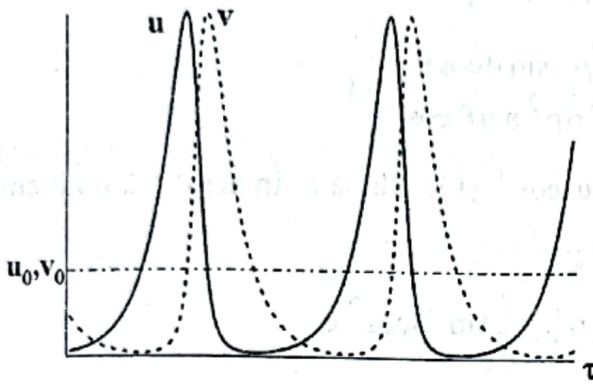


Fig. 3.15 a

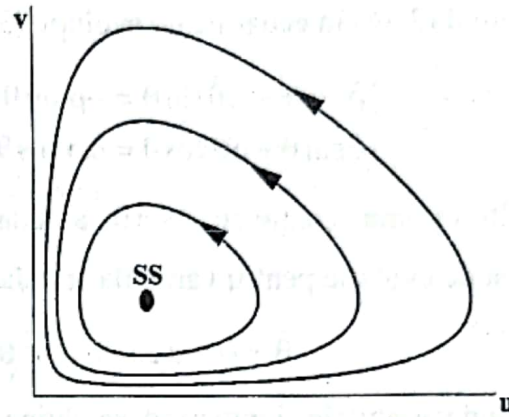


Fig. 3.15 b

b) În planul fazelor, există o infinitate de orbite închise ce înconjoară punctul fix (fig. 3.15 b); acesta se numește centru. Din ecuațiile de evoluție (3.78), rezultă

$$\frac{dv}{du} = \alpha \frac{v(u-1)}{u(1-v)}$$

de unde, separînd variabilele, se obține

$$\left(\frac{1}{v} - 1\right) dv = \alpha \left(1 - \frac{1}{u}\right) du$$

ale cărei soluții sînt de forma

$$\alpha u + v - \ln u^\alpha v = H. \quad (3.85)$$

unde

$$H \geq 1 + \alpha$$

este o constantă (integrală a mișcării). (3.85) reprezintă ecuația implicită a traiectoriei fazice. Fiecărei valori a constantei H îi corespunde o traiectorie distinctă.

Din această proprietate, rezultă neajunsul principal al modelului L-V: soluțiile nu sînt structural stabile. Presupunem că punctul fazic reprezentativ se deplasează în jurul punctului fix, pe o orbită închisă. Aceasta posedă stabilitate marginală și o mică perturbație va deplasa sistemul pe o traiectorie vecină, corespunzătoare unei alte condiții inițiale.

c) Sistemul admite un spectru continuu de frecvențe.

Trecem la coordonate polare

$$\begin{cases} u = 1 + \rho \cos \theta \\ v = 1 + \rho \sin \theta \end{cases} \quad (3.86)$$

Înlocuind (3.86) în ecuațiile de evoluție (3.78), se obține

$$\begin{cases} \dot{\rho} \cos \theta - \rho \dot{\theta} \sin \theta = -\rho \sin \theta - \rho^2 \sin \theta \cos \theta \\ \dot{\rho} \sin \theta + \rho \dot{\theta} \cos \theta = \alpha \rho \cos \theta + \alpha \rho^2 \sin \theta \cos \theta \end{cases}$$

Înmulțim prima ecuație cu $-\sin \theta$, a doua cu $\cos \theta$ și le adunăm. În acest fel, obținem ecuația de evoluție pentru variabila angulară

$$\dot{\theta} = (1 + \rho \cos \theta) \sin^2 \theta + \alpha (1 + \rho \sin \theta) \cos^2 \theta$$

Separând variabilele și integrând, se obține

$$T = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{(1 + \rho \cos \theta) \sin^2 \theta + \alpha (1 + \rho \sin \theta) \cos^2 \theta} \quad (3.87)$$

unde T este perioada de oscilație. În acord cu (3.87), pentru sistemul L-V, există un spectru continuu de frecvențe, datorită numărului infinit de cicluri posibile, care depind de condiția inițială. În acest sistem, nu există un mecanism de atenuare a fluctuațiilor, deci nu există o orbită medie, în vecinătatea căreia să se mențină sistemul. Soluțiile acestuia nu sînt asimptotic stabile.

3.2.2. Modele pradă-prădător realiste

Una dintre presupunerile nerealiste ale modelului L-V este că, în absența prădătorului, prada se poate înmulți oricît de mult. În transformarea (3.73)



dacă densitatea resurselor este presupusă constantă, densitatea prăzii crește exponențial și tinde la infinit. Un model pradă-prădător mai realist este descris de ecuațiile de evoluție [13]

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = X \left[r \left(1 - \frac{X}{k_1} \right) - \frac{k_2 Y}{X + D} \right] \\ \frac{dY}{dt} = Y \left[s \left(1 - \frac{hY}{X} \right) \right] \end{cases} \quad (3.88)$$

Trecem la variabile adimensionale, cu ajutorul transformărilor

$$u(\tau) = \frac{X(t)}{k_1}; \quad v(\tau) = \frac{hY(t)}{k_1}; \quad \tau = rt \quad (3.89)$$

Facem notațiile

$$a = \frac{k_2}{hr}; \quad b = \frac{s}{r}; \quad d = \frac{D}{k_1} \quad (3.90)$$

Cu (3.89) și (3.90), ecuațiile de evoluție (3.88) devin

$$\begin{cases} \frac{du}{d\tau} = u(1-u) - \frac{auv}{u+d} = f(u, v) \\ \frac{dv}{d\tau} = bv\left(1 - \frac{v}{u}\right) = g(u, v) \end{cases} \quad (3.91)$$

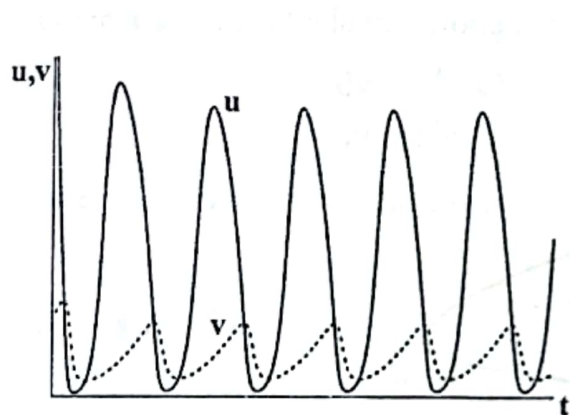


Fig. 3.16 a

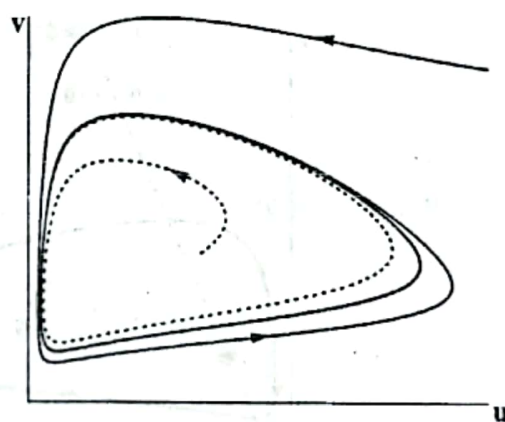


Fig. 3.16 b

Din condiția de staționaritate și impunând ca soluția să fie pozitivă, se obține

$$\begin{cases} u_0 = \frac{(1-a-d) + [(1-a-d)^2 + 4d]^{1/2}}{2} \\ v_0 = u_0 \end{cases} \quad (3.92)$$

Din (3.91) rezultă că matricea Jacobiană, evaluată la starea staționară, este

$$A = \begin{pmatrix} u_0 \left(\frac{au_0}{(u_0+d)^2} - 1 \right) & -\frac{au_0}{u_0+d} \\ b & -b \end{pmatrix} \quad (3.93)$$

În acord cu ecuația (3.33), condițiile de stabilitate sînt (fig. 3.3)

$$\begin{aligned} \text{tr } A < 0 &\Rightarrow u_0 \left[\frac{au_0}{(u_0+d)^2} - 1 \right] < b \\ \det A > 0 &\Rightarrow 1 + \frac{a}{u_0+d} - \frac{au_0}{(u_0+d)^2} > 0 \end{aligned} \quad (3.94)$$

Dacă $\text{tr } A > 0$, $\det A > 0$ și $(\text{tr } A) - 4 \det A < 0$, starea staționară este un focar instabil, și sistemul prezintă un comportament periodic de tip ciclu limită (fig. 3.16): indiferent de condiția inițială, traiectoria tinde spre curba închisă din spațiul fazelor care este ciclul limită.

Evoluția în spațiul fazelor poate fi analizată în mod calitativ cu ajutorul *nulclinelor*. Acestea corespund condiției de anulare a unei derivate în raport cu timpul din ecuațiile de evoluție. Una dintre nulcline corespunde condiției

$$\frac{du}{dt} = 0 \Rightarrow f(u, v) = 0 \quad (3.95)$$

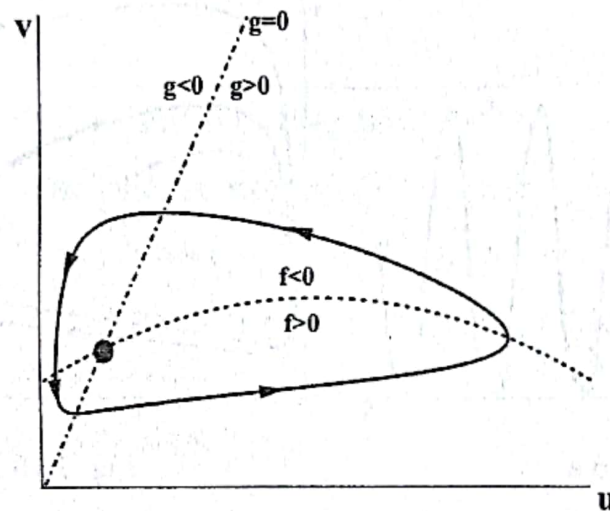


Fig. 3.16 c

Curba corespunzătoare este reprezentată prin linie întreruptă, în fig. 3.16 c. Deasupra acesteia, funcția f este negativă, ceea ce înseamnă că $du/dt < 0$. Orice traiectorie fazică cu condiția inițială situată deasupra acestei nulcline se va deplasa în sensul scăderii lui u . Sub curbă, f este pozitivă, deci traiectoriile fazice se deplasează în sensul creșterii lui u . Cealaltă nulclină corespunde condiției

$$\frac{dv}{dt} = 0 \Rightarrow g(u, v) = 0 \quad (3.96)$$

În cazul studiat, aceasta este ecuația unei drepte, reprezentate prin linie-punct în fig. 3.16 c. Traiectoriile aflate la stânga se deplasează în sensul scăderii lui v , iar traiectoriile aflate la dreapta se deplasează în sensul creșterii lui v . În exemplul dat, nulclinele se intersectează într-un singur punct, care, în acord cu (3.95) și (3.96), corespunde unei stări staționare a sistemului considerat. Dacă există mai multe puncte

de intersecție, sistemul admite stări staționare multiple. În fig. 3.16 c, cele două nulcline împart zona ($u > 0, v > 0$) a spațiului fazelor, în care se află soluțiile cu semnificație fizică ale ecuațiilor (3.91), în patru regiuni, cărora le corespund direcții distincte de propagare a traiectoriilor fazice. În fig. 3.16 c se observă în ce mod propagarea de-a lungul ciclului limită se conformează condițiilor de semn pentru funcțiile f și g . De asemenea, la intersecția ciclului limită cu nulclinele, acesta este paralel la una dintre axele de coordonate ale planului fazic.

Desigur, analiza traiectoriilor fazice cu ajutorul nulclinelor este calitativă. Funcțiile f și g depind de u și v , deci sînt funcții de poziția în spațiul fazelor. Orientarea tangentei la traiectoria fazică este dată de

$$\frac{dv}{du} = \frac{g(u, v)}{f(u, v)}$$

care reprezintă viteza fazică; aceasta este, de asemenea, funcție de u și v .

Aplicația 3.11

Considerăm sistemul [14]

$$\begin{cases} \dot{x} = 16x^2 + 9y^2 - 25 = f(x, y) \\ \dot{y} = 16x^2 - 16y^2 = g(x, y) \end{cases} \quad (3.97)$$

Determinați stările staționare ale sistemului.

- Discutați stabilitatea acestora utilizînd nulcline;
- Studiați stabilitatea stărilor staționare prin metoda modurilor normale.

Rezolvare

- Figura 3.17 prezintă planul fazelor. Nulclina pentru prima ecuație din (3.97) este

$$16x^2 + 9y^2 = 25$$

care constituie ecuația unei elipse, iar nulclinele pentru a doua ecuație din (3.97) sînt $y = x$ și $y = -x$, care reprezintă bisectoarele axelor de coordonate. Intersecțiile nulclinelor dau patru stări staționare:

$$\begin{cases} x_{01} = 1 \\ y_{01} = 1 \end{cases}, \begin{cases} x_{02} = 1 \\ y_{02} = -1 \end{cases}, \begin{cases} x_{03} = -1 \\ y_{03} = 1 \end{cases} \text{ și } \begin{cases} x_{04} = -1 \\ y_{04} = -1 \end{cases} \quad (3.98)$$

Ținînd seama de semnul funcțiilor f și g în vecinătatea punctelor fixe, fluxul fazic are

orientarea prezentată în fig. 3.17. Ca urmare, starea staționară 3 este stabilă, starea 2 este instabilă, iar stările 1 și 4 sînt tot instabile, fiind puncte șea.

b) Plecînd de la ecuațiile (3.97), ecuația caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} 32x_0 - \omega & 18y_0 \\ 32x_0 & -32y_0 - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (3.99)$$

Introducînd (3.98) în (3.99), se obțin valorile proprii pentru cele patru stări staționare:

- pentru starea staționară 1, $\begin{cases} \omega_1 = 40 \\ \omega_2 = -40 \end{cases}$. Aceasta este un punct șea;
- pentru starea staționară 2, $\omega_{1,2} = 32 \pm 24i$. Aceasta este un focar instabil;
- pentru starea staționară 3, $\omega_{1,2} = -32 \pm 24i$. Aceasta este un focar stabil;
- pentru starea staționară 4, $\begin{cases} \omega_1 = 40 \\ \omega_2 = -40 \end{cases}$. Aceasta este un punct șea.

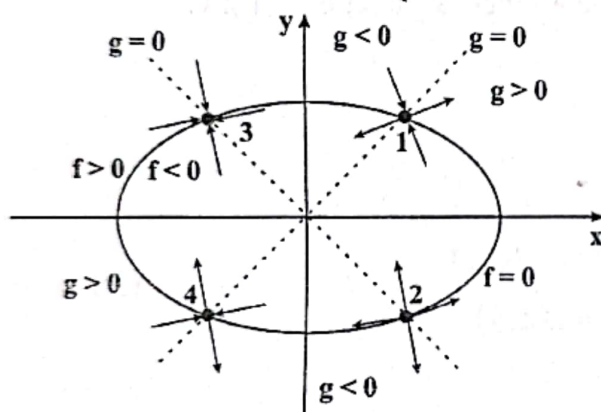


Fig. 3.17

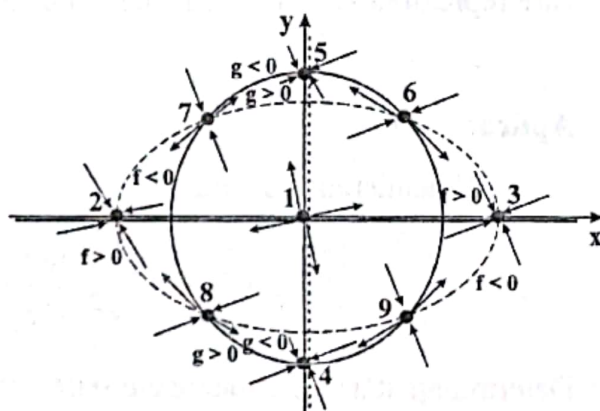


Fig. 3.18

Aplicația 3.12

Considerăm sistemul [14]

$$\begin{cases} \dot{x} = x(1 - x^2 - 6y^2) = f(x, y) \\ \dot{y} = y(1 - 3x^2 - 3y^2) = g(x, y) \end{cases} \quad (3.100)$$

Determinați stările staționare ale sistemului.

- a) Discuțați stabilitatea acestora utilizînd nulcline;
- b) Studiați stabilitatea stărilor staționare prin metoda modurilor normale.

Rezolvare

- a) Pentru prima ecuație din (3.100), nulclinele sînt date de axa Oy și elipsa de ecuație

$$x^2 + 6y^2 = 1$$

Pentru a doua ecuație din (3.100), nulclinele sînt date de axa Ox și cercul de ecuație

$$3x^2 + 3y^2 = 1$$

Intersecțiile celor două grupuri de nulcline dau nouă puncte fixe (fig. 3.18):

$$\begin{aligned} (x_{01} = 0, y_{01} = 0); \quad (x_{02} = -1, y_{02} = 0); \quad (x_{03} = 1, y_{03} = 0); \quad \left(x_{04} = 0, y_{04} = -\frac{1}{\sqrt{3}}\right); \\ \left(x_{05} = 0, y_{05} = \frac{1}{\sqrt{3}}\right); \quad \left(x_{06} = \frac{1}{\sqrt{5}}; y_{06} = \sqrt{\frac{2}{15}}\right); \quad \left(x_{07} = -\frac{1}{\sqrt{5}}; y_{07} = \sqrt{\frac{2}{15}}\right); \\ \left(x_{08} = -\frac{1}{\sqrt{5}}; y_{08} = -\sqrt{\frac{2}{15}}\right); \left(x_{09} = \frac{1}{\sqrt{5}}; y_{09} = -\sqrt{\frac{2}{15}}\right). \end{aligned} \quad (3.101)$$

Studiind semnele pe care le au f și g în vecinătatea stărilor staționare, se obține divergența sau convergența traiectoriilor fazice în apropierea punctelor fixe, așa cum este reprezentată în fig. 3.18. Rezultă că originea este un nod instabil, stările staționare 2, 3, 4 și 5 sînt noduri stabile, iar stările staționare 6, 7, 8 și 9 sînt puncte șea, deci sînt instabile.

b) Din ecuațiile de evoluție (3.100), rezultă că ecuația caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} 1 - 3x_0^2 - 6y_0^2 - \omega & -12x_0y_0 \\ -6x_0y_0 & 1 - 3x_0^2 - 9y_0^2 - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (3.102)$$

Înlocuind coordonatele punctelor fixe date de (3.101) în (3.102), se obțin următoarele valori proprii:

- pentru starea staționară 1, $\omega_1 = \omega_2 = 1$. Aceasta este un nod instabil;
- pentru stările staționare 2 și 3, $\omega_1 = -1$; $\omega_2 = -2$. Acestea sînt noduri stabile;
- pentru stările staționare 4 și 5, $\omega_1 = \omega_2 = -1$. Acestea sînt noduri stabile;
- pentru stările staționare 6, 7, 8 și 9, $\omega_1 > 0$; $\omega_2 < 0$. Acestea sînt puncte șea.

Aplicația 3.13

Considerăm sistemul ecuațiilor de evoluție [10]

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = 2x_1 - x_2 = f(x_1, x_2) \\ \dot{x}_2 = x_1^2 + 4x_2 = g(x_1, x_2) \end{cases} \quad (3.103)$$

Găsiți stările staționare ale sistemului și determinați stabilitatea acestora. Studiați, cu ajutorul nulclinelor, direcția traiectoriilor fazice în vecinătatea punctelor fixe.

Rezolvare

Sistemul (3.103) admite stările staționare

$$\begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 = 0 \end{cases} \text{ și } \begin{cases} x_1 = -8 \\ x_2 = -16 \end{cases} \quad (3.104)$$

Ecuția caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} 2 - \omega & -1 \\ 2(x_1)_0 & 4 - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (3.105)$$

Pentru prima dintre stările staționare (3.104), valorile proprii sînt

$$\omega_1 = 2; \omega_2 = 4$$

Originea axelor de coordonate constituie un nod instabil. Pentru a doua dintre stările staționare (3.104), valorile proprii sînt

$$\omega_{1,2} = 3 \pm \sqrt{17}$$

Această stare staționară constituie un punct șea. Din (3.103), rezultă forma nulclinelor prezentată în fig. 3.19.

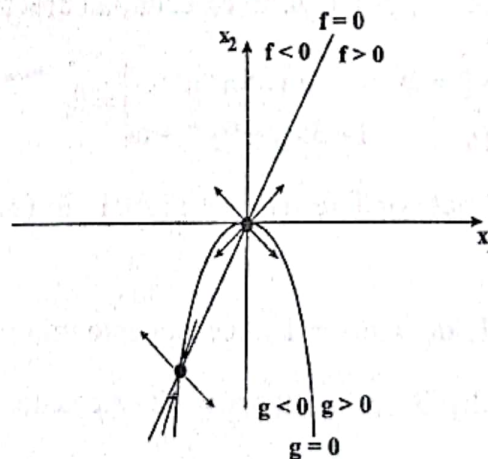


Fig. 3.19

Aplicația 3.14

Se consideră următoarele sisteme de ecuații de evoluție [5]

$$a) \begin{cases} \dot{x}_1 = x_1 - x_2 \\ \dot{x}_2 = 1 - e^{x_1} \end{cases} \quad (3.106)$$

$$b) \begin{cases} \dot{x}_1 = -x_1 + x_1^3 \\ \dot{x}_2 = -2x_2 \end{cases} \quad (3.107)$$

$$c) \begin{cases} \dot{x}_1 = x_1 - x_1^3 \\ \dot{x}_2 = -x_2 \end{cases} \quad (3.108)$$

$$d) \begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 \\ \dot{x}_2 = x_1(1 + x_2) - 1 \end{cases} \quad (3.109)$$

$$e) \begin{cases} \dot{x}_1 = x_1^2 - x_2 \\ \dot{x}_2 = x_1 - x_2 \end{cases} \quad (3.110)$$

Determinați stările staționare ale acestora. Pentru cazurile (a), (d) și (e) discutați stabilitatea stărilor staționare cu ajutorul nulclinelor. Pentru toate sistemele, realizați analiza liniară de stabilitate și trasați portretul fazelor.

Rezolvare

a) Nulclinele sistemului (3.106) sînt prezentate în fig. 3.20a. Cu f și g am notat membrul drept din prima, respectiv a doua ecuație de evoluție.

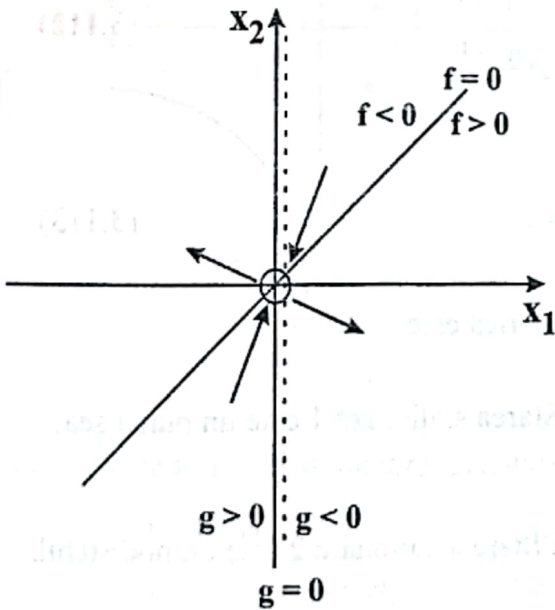


Fig. 3.20 a

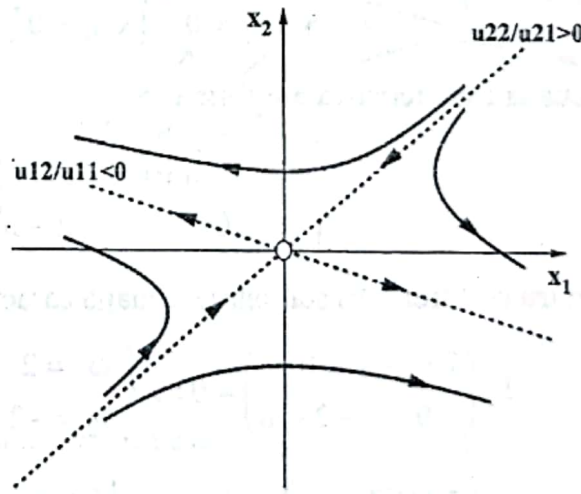


Fig. 3.20 b

Acestea admit o singură intersecție, care este originea planului fazic. Ținând cont de orientarea fluxului fazic în jurul punctului fix, rezultă că acesta este un punct șea.

Ecuația caracteristică este

$$\begin{vmatrix} 1 - \omega & -1 \\ -1 & -\omega \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \omega^2 - \omega - 1 = 0 \quad (3.111)$$

Soluțiile acesteia sînt

$$\omega_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2}$$

Faptul că $\omega_1 > 0$ și $\omega_2 < 0$ confirmă că punctul fix este punct șea. Vectorii proprii satisfac

$$\left(1 - \frac{1 + \sqrt{5}}{2}\right)u_{11} - u_{12} = 0 \Rightarrow \frac{u_{12}}{u_{11}} = \frac{1 - \sqrt{5}}{2}$$

Deoarece $\omega_1 > 0$, pe această direcție are loc expansiunea traiectoriilor fazice (fig. 3.20 b). Acesta este subspațiul instabil al spațiului fazelor. Al doilea vector propriu satisface

$$\frac{u_{22}}{u_{21}} = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} > 0$$

Deoarece $\omega_2 < 0$, pe această direcție are loc contracția traiectoriilor fazice (fig. 3.20 b). Acesta este subspațiul stabil al spațiului fazelor.

b) Sistemul admite stările staționare

$$\begin{cases} x_{10} = -1 \\ x_{20} = 0 \end{cases}; \begin{cases} x_{10} = 0 \\ x_{20} = 0 \end{cases}; \begin{cases} x_{10} = 1 \\ x_{20} = 0 \end{cases} \quad (3.112)$$

Ecuția caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} -1 + 3x_{10}^2 - \omega & 0 \\ 0 & -2 - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (3.113)$$

Pentru cele trei stări staționare, ecuația caracteristică este

$$1) \begin{pmatrix} 2 - \omega & 0 \\ 0 & -2 - \omega \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 = 2 \\ \omega_2 = -2 \end{cases}. \text{ Starea staționară 1 este un punct șea.}$$

$$2) \begin{pmatrix} -1 - \omega & 0 \\ 0 & -2 - \omega \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 = -1 \\ \omega_2 = -2 \end{cases}. \text{ Starea staționară 2 este un nod stabil.}$$

$$3) \begin{pmatrix} 2 - \omega & 0 \\ 0 & -2 - \omega \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 = 2 \\ \omega_2 = -2 \end{cases}. \text{ Starea staționară 3 este un punct șea.}$$

Portretul fazelor este reprezentat în fig. 3.21.

c) Sistemul admite stările staționare

$$\begin{cases} x_{10} = -1 \\ x_{20} = 0 \end{cases}; \begin{cases} x_{10} = 0 \\ x_{20} = 0 \end{cases}; \begin{cases} x_{10} = 1 \\ x_{20} = 0 \end{cases} \quad (3.114)$$

Ecuția caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} 1 - 3x_{10}^2 - \omega & 0 \\ 0 & -1 - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (3.115)$$

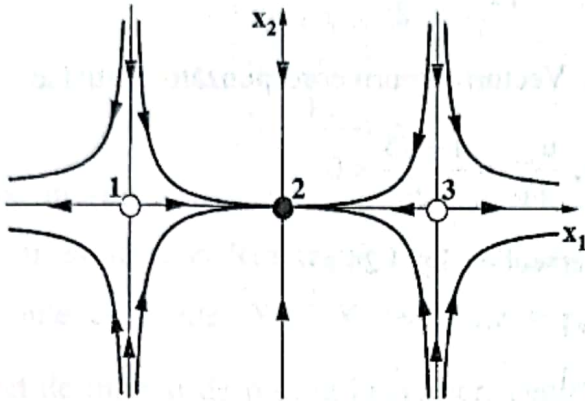


Fig. 3.21

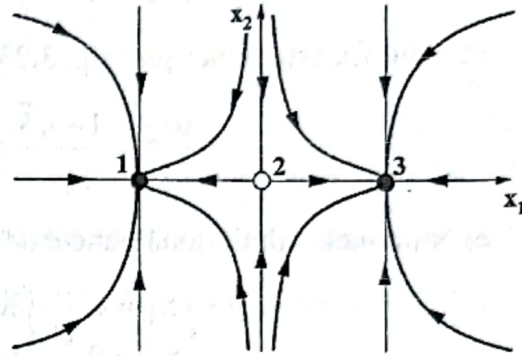


Fig. 3.22

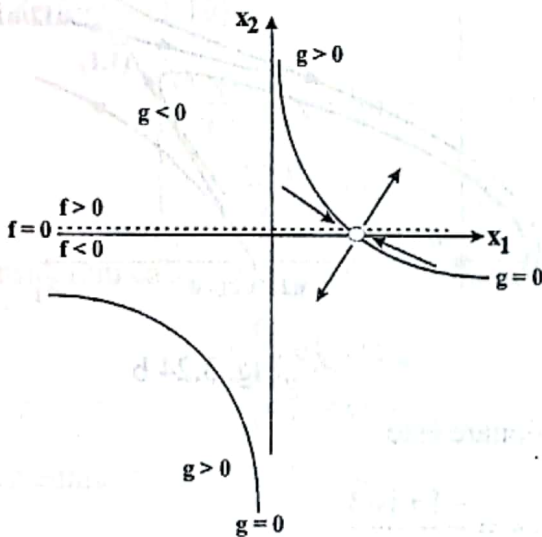


Fig. 3.23 a

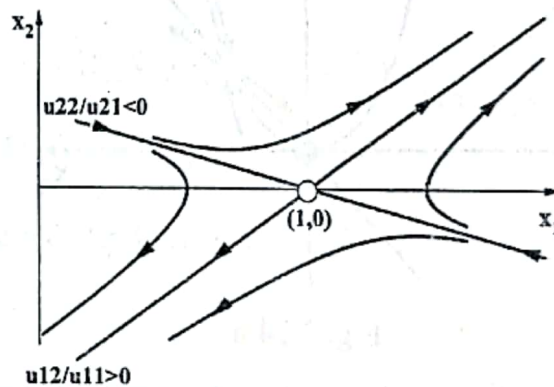


Fig. 3.23 b

Pentru cele trei stări staționare, ecuația caracteristică este

$$1) \begin{pmatrix} -2 - \omega & 0 \\ 0 & -1 - \omega \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 = -2 \\ \omega_2 = -1 \end{cases}. \text{ Starea staționară 1 este un nod stabil.}$$

$$2) \begin{pmatrix} 1 - \omega & 0 \\ 0 & -1 - \omega \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 = -1 \\ \omega_2 = 1 \end{cases}. \text{ Starea staționară 2 este un punct șea.}$$

$$3) \begin{pmatrix} -2 - \omega & 0 \\ 0 & -1 - \omega \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 = -2 \\ \omega_2 = -1 \end{cases}. \text{ Starea staționară 3 este un nod stabil.}$$

Portretul fazelor este reprezentat în fig. 3.22.

d) Nulclinele admit un singur punct de intersecție (fig. 3.23 a), $(x_1 = 1, x_2 = 0)$.

Ecuția de vectori și valori proprii are forma

$$\begin{pmatrix} -\omega & 1 \\ 1 & 1-\omega \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \omega_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2}$$

Punctul fix este punct șea (fig. 3.23 b). Vectorii proprii corespunzători satisfac

$$\frac{u_{12}}{u_{11}} = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} > 0; \quad \frac{u_{22}}{u_{21}} = \frac{1 - \sqrt{5}}{2} < 0$$

e) Nulclinele admit două puncte de intersecție (fig. 3.24 a)

$$\begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 = 0 \end{cases} \text{ și } \begin{cases} x_1 = 1 \\ x_2 = 1 \end{cases}$$

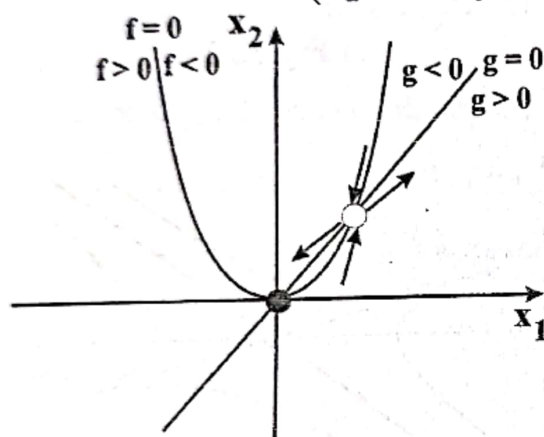


Fig. 3.24 a

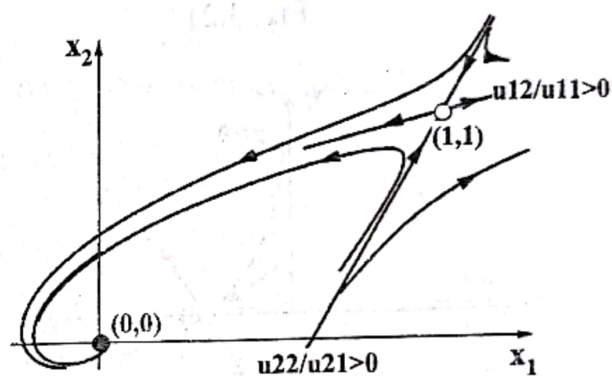


Fig. 3.24 b

Ecuția caracteristică pentru aceste stări staționare este

$$\begin{vmatrix} -\omega & -1 \\ 1 & -1-\omega \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \omega_{1,2} = \frac{-1 \pm i\sqrt{3}}{2}$$

respectiv

$$\begin{vmatrix} 2-\omega & -1 \\ 1 & -1-\omega \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \omega_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2}$$

Starea staționară $(0,0)$ este un focar stabil, iar starea staționară $(1,1)$ este un punct șea.

Vectorii proprii corespunzători stării staționare $(1,1)$ satisfac

$$\frac{u_{12}}{u_{11}} = \frac{3 - \sqrt{5}}{2} > 0 \text{ și } \frac{u_{22}}{u_{21}} = \frac{3 + \sqrt{5}}{2} > 0$$

Portretul fazelor este prezentat în fig. 3.24 b.

d) Nulclinele admit un singur punct de intersecție (fig. 3.23 a), $(x_1 = 1, x_2 = 0)$.

Ecuatia de vectori și valori proprii are forma

$$\begin{pmatrix} -\omega & 1 \\ 1 & 1-\omega \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \omega_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2}$$

Punctul fix este punct șea (fig. 3.23 b). Vectorii proprii corespunzători satisfac

$$\frac{u_{12}}{u_{11}} = \frac{1+\sqrt{5}}{2} > 0; \quad \frac{u_{22}}{u_{21}} = \frac{1-\sqrt{5}}{2} < 0$$

e) Nulclinele admit două puncte de intersecție (fig. 3.24 a)

$$\begin{cases} x_1 = 0 \\ x_2 = 0 \end{cases} \text{ și } \begin{cases} x_1 = 1 \\ x_2 = 1 \end{cases}$$

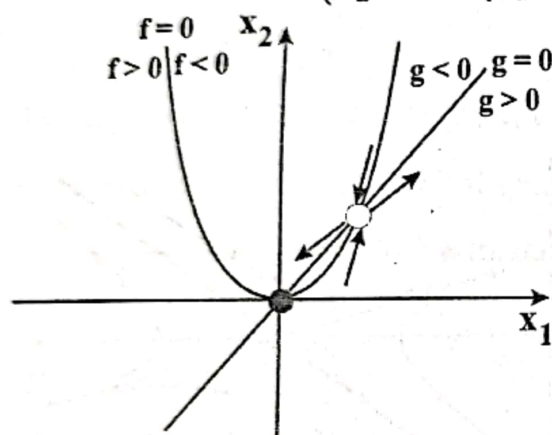


Fig. 3.24 a

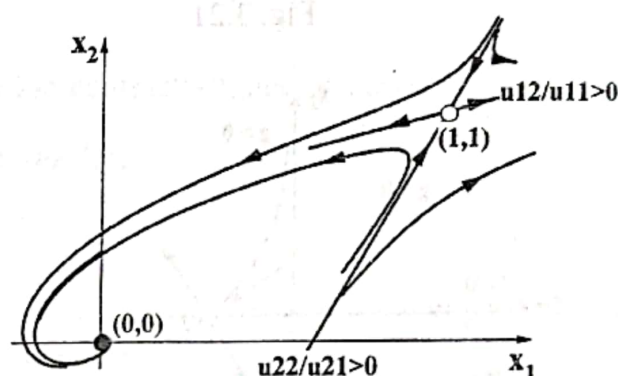


Fig. 3.24 b

Ecuatia caracteristică pentru aceste stări staționare este

$$\begin{vmatrix} -\omega & -1 \\ 1 & -1-\omega \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \omega_{1,2} = \frac{-1 \pm i\sqrt{3}}{2}$$

respectiv

$$\begin{vmatrix} 2-\omega & -1 \\ 1 & -1-\omega \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \omega_{1,2} = \frac{1 \pm \sqrt{5}}{2}$$

Starea staționară $(0,0)$ este un focar stabil, iar starea staționară $(1,1)$ este un punct șea.

Vectorii proprii corespunzători stării staționare $(1,1)$ satisfac

$$\frac{u_{12}}{u_{11}} = \frac{3-\sqrt{5}}{2} > 0 \text{ și } \frac{u_{22}}{u_{21}} = \frac{3+\sqrt{5}}{2} > 0$$

Portretul fazelor este prezentat în fig. 3.24 b.

3.3. Metoda modurilor normale în sisteme extinse spațial

Considerăm că reacțiile ce alcătuiesc modelul trimolecular [7]



au loc într-un sistem extins spațial, în care, pe lângă reacțiile chimice, are loc și procesul de difuzie. Reactanții A și B alimentează reactorul și concentrațiile lor sînt menținute constante. X și Y constituie specii intermediare, ale căror concentrații depind de timp și de poziția în reactor. Pentru simplitate, considerăm $k_i = 1, i = \overline{1, n}$. Suficient de departe de echilibru, reacțiile inverse pot fi neglijate. Ecuațiile de evoluție sînt de forma (1.19)

$$\begin{cases} \frac{\partial c_X}{\partial t} = c_A - (c_B + 1)c_X + c_X^2 c_Y + D_X \nabla^2 c_X \\ \frac{\partial c_Y}{\partial t} = c_B c_X - c_X^2 c_Y + D_Y \nabla^2 c_Y \end{cases} \quad (3.117)$$

Considerăm că sistemul are condiții la frontieră de tip Dirichlet

$$\begin{cases} c_X^\Sigma = c_A \\ c_Y^\Sigma = c_B / c_A \end{cases} \quad (3.118)$$

sau Neumann

$$\vec{n} \cdot \left(\frac{\partial c_X}{\partial \vec{r}} \right)^\Sigma = \vec{n} \cdot \left(\frac{\partial c_Y}{\partial \vec{r}} \right)^\Sigma \quad (3.119)$$

În primul caz, concentrațiile intermediarilor sînt fixate pe frontiera sistemului, notată cu Σ . În cazul al doilea, sînt impuse anumite valori (de obicei zero) pentru gradientii de concentrație normali la frontiera sistemului. Ecuațiile de evoluție (3.117), cu condițiile la frontieră (3.118) sau (3.119), admit o singură stare staționară uniformă

$$\begin{cases} c_{X_0} = c_A \\ c_{Y_0} = c_B / c_A \end{cases} \quad (3.120)$$

Considerăm mici perturbații în jurul stării staționare

$$\begin{cases} c_X = c_A + x \\ c_Y = \frac{c_B}{c_A} + y \end{cases}$$

Evoluția perturbațiilor este descrisă, într-o primă aproximație, de o ecuație liniarizată de evoluție

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = L \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (3.121)$$

cu condițiile la frontieră

$$x = y = 0 \text{ pe } \Sigma$$

sau

$$\vec{n} \cdot \nabla x = \vec{n} \cdot \nabla y = 0 \text{ pe } \Sigma$$

Din ecuațiile de evoluție (3.117), rezultă că operatorul liniarizat are forma

$$L = \begin{pmatrix} c_B - 1 + D_X \nabla^2 & c_A^2 \\ -c_B & -c_A^2 + D_Y \nabla^2 \end{pmatrix} \quad (3.122)$$

În acord cu (3.121) și (3.122), ecuația de vectori și valori proprii este

$$\begin{pmatrix} c_B - 1 + D_X \nabla^2 & c_A^2 \\ -c_B & -c_A^2 + D_Y \nabla^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_m \\ v_m \end{pmatrix} = \omega_m \begin{pmatrix} u_m \\ v_m \end{pmatrix} \quad (3.123)$$

cu condițiile la frontieră

$$u_m^\Sigma = v_m^\Sigma = 0 \quad (3.124)$$

sau

$$\vec{n} \cdot \nabla u_m^\Sigma = \vec{n} \cdot \nabla v_m^\Sigma = 0 \quad (3.125)$$

Soluțiile ecuației (3.123) sînt de forma

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \sum_m a_m e^{\omega_m t} \begin{pmatrix} u_m \\ v_m \end{pmatrix}$$

Starea staționară de referință, $\left(c_A, \frac{c_B}{c_A}\right)$ este asimptotic stabilă dacă toate valorile

proprii ω_m satisfac $\text{Re} \omega_m < 0$. Dacă anumite valori proprii au $\text{Re} \omega_m > 0$, starea de referință este instabilă.

Considerăm un sistem unidimensional, mărginit spațial, de lungime l .

Laplaceanul are forma $\nabla^2 = \frac{d^2}{dr^2}$ $0 \leq r \leq l$. Vectorii proprii, $\begin{pmatrix} u_m \\ v_m \end{pmatrix}$, sînt de forma

$$\begin{pmatrix} u_m \\ v_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \sin \frac{m\pi r}{l} \quad m = 1, 2, \dots \quad (3.126)$$

pentru condiții la frontieră de tipul (3.124), sau

$$\begin{pmatrix} u_m \\ v_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \cos \frac{m\pi r}{l} \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (3.127)$$

pentru (3.125). Din (3.126) și (3.127), se observă că în sistemul cu extindere spațială finită poate să apară un mod omogen spațial ($m = 0$) sau moduri normale a căror lungime de undă este legată de dimensiunea caracteristică a sistemului, l , prin relația

$$\lambda_m = 2 \frac{l}{m}$$

Înlocuind (3.126) sau (3.127) în (3.123), se obține ecuația caracteristică

$$\omega_m^2 + (\beta_m - \alpha_m)\omega_m + c_A^2 c_B - \alpha_m \beta_m = 0 \quad (3.128)$$

cu

$$\begin{cases} \alpha_m = c_B - 1 - \frac{m^2 \pi^2}{l^2} D_X \\ \beta_m = c_A^2 + \frac{m^2 \pi^2}{l^2} D_Y \end{cases} \quad (3.129)$$

Soluțiile ecuației (3.128) sînt

$$\omega_m^\pm = \frac{1}{2} \left\{ \alpha_m - \beta_m \pm \sqrt{(\alpha_m + \beta_m)^2 - 4c_A^2 c_B} \right\}$$

unde m reprezintă indicele modului normal. Sînt valabile rezultatele:

a) Dacă $m \rightarrow \infty$, din (3.129), rezultă că $(\alpha_m + \beta_m)^2 \rightarrow \infty$. Rădăcinile $\omega_m^\pm$ sînt reale și negative. Ca urmare, rezultă că modurile cu $m \rightarrow \infty$ (cu lungime de undă mare) tind să stabilizeze sistemul.

b) Valorile proprii ω_m sînt complexe dacă

$$(\alpha_m + \beta_m)^2 - 4c_A^2 c_B < 0$$

Ținînd cont de (3.129), această condiție se reduce la

$$D_Y - D_X \leq \frac{l^2}{m^2 \pi^2}$$

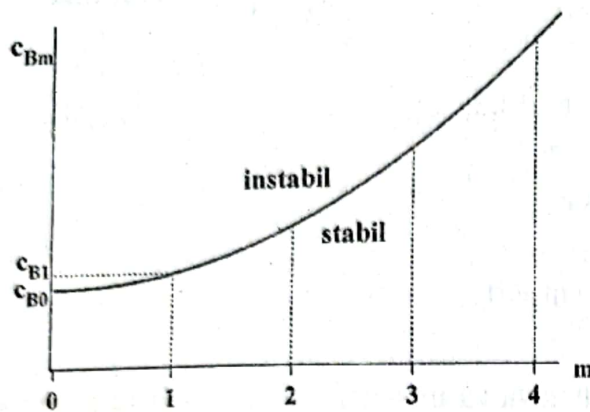


Fig. 3.25 a

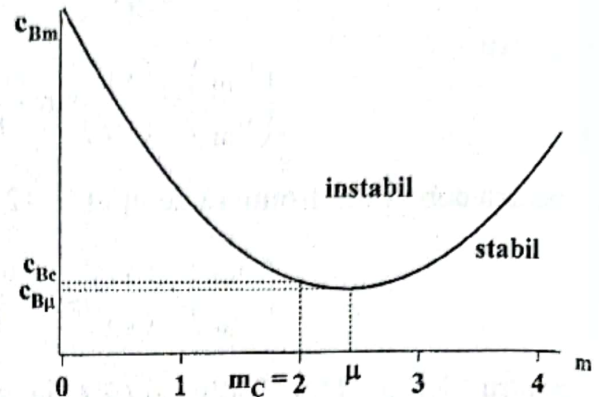


Fig. 3.25 b

c) O valoare proprie complexă are partea reală pozitivă dacă coeficientul lui ω în ecuația caracteristică (3.128) este negativ, ceea ce implică ca parametrul de control, c_B , să depășească o anumită valoare critică,

$$c_B > c_A^2 + 1 + \frac{m^2 \pi^2}{l^2} (D_X + D_Y)$$

Numim

$$\tilde{c}_{B_m} = c_A^2 + 1 + \frac{m^2 \pi^2}{l^2} (D_X + D_Y)$$

curbă critică. Diagrama de stabilitate asociată bifurcației cu apariția soluțiilor periodice în timp (ω are parte imaginară nenulă) este prezentată în fig. 3.25 a. Concentrația lui B joacă rolul de parametru de control. Urmărim ce se întâmplă în sistem la creșterea acesteia. La primul punct de bifurcație $\tilde{c}_{B_0} = c_A^2 + 1$, apare întotdeauna un ciclu limită omogen spațial (fig. 3.25 a). Pentru un ordin m superior, acesta bifurcă cu ruperea simetriei spațiale.

d) Dacă ω_m este real, ecuația caracteristică (3.128) admite o rădăcină pozitivă dacă

$$\alpha_m \beta_m - c_A^2 c_B > 0$$

ceea ce conduce la

$$c_B > 1 + \frac{D_X}{D_Y} c_A^2 + \frac{c_A^2}{D_Y m^2 \pi^2} l^2 + \frac{D_X m^2 \pi^2}{l^2} \quad (3.130)$$

Deoarece $\text{Im}(\omega_m = 0)$, diagrama de stabilitate este asociată bifurcației soluțiilor staționare, cu apariția *structurilor spațiale* (numite și structuri Turing). Punctul c_{B_C} se află în vecinătatea minimului c_{B_μ} al curbei de stabilitate marginală. În general, $c_{B_C} \neq c_{B_\mu}$ (fig. 3.25 b). Conform (3.130), curba critică este

$$\tilde{c}_{B_m} = 1 + \frac{D_X}{D_Y} c_A^2 + \frac{c_A^2}{D_Y m^2 \pi^2} l^2 + \frac{D_X m^2 \pi^2}{l^2} \quad (3.131)$$

Cu creșterea parametrului de control c_B , prima instabilitate apare în $c_B = c_{B_C}$, corespunzând întregului m_C cel mai apropiat de minimul curbei critice (μ, c_{B_μ}) .

Condiția de extrem pentru (3.131) este satisfăcută de

$$\begin{cases} \mu^2 = \frac{c_A l^2}{\pi^2 (D_X D_Y)^{1/2}} \\ c_{B_\mu} = \left[1 + \left(\frac{D_X}{D_Y} \right)^{1/2} c_A \right]^2 \end{cases}$$

Diagrama de stabilitate este prezentată în fig. 3.25 b.

4. Bifurcații

Considerăm ecuația de evoluție

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \vec{F}(\vec{X}, \lambda) \quad (4.1)$$

Comportamentul asimptotic al sistemului descris de ecuația (4.1) îi corespunde o anumită mulțime invariantă. Dacă aceasta este stabilă, îi corespunde un atractor al sistemului dinamic. Pe măsură ce parametrul de control λ se modifică, mulțimea invariantă se schimbă. Este posibil ca o mică modificare a lui λ să producă o schimbare calitativă a mulțimii invariante. Aceasta se numește *bifurcație*, iar λ se numește *parametru de bifurcație*. Un exemplu tipic de bifurcație este prezentat în paragraful 1.2 (inelul rotitor). Bifurcațiile apar în sisteme omogene sau sisteme distribuite spațial, în sisteme cu timp continuu sau sisteme discrete. În acest capitol vom prezenta bifurcațiile în sisteme cu timp continuu, omogene sau distribuite spațial.

4.1. Comportarea neliniară în jurul punctelor fixe: analiza de bifurcație

Presupunem că ecuația (4.1) admite punctul fix $\vec{X}_0$

$$\vec{F}(\vec{X}_0, \lambda) = 0 \quad (4.2)$$

Așa cum am văzut în capitolul anterior, stabilitatea punctelor fixe poate fi analizată prin metoda micilor perturbații. Starea perturbată este

$$\vec{X} = \vec{X}_0 + \vec{x} \quad (4.3)$$

Înlocuind (4.3) în (4.1), ecuația de evoluție pentru perturbații poate fi scrisă

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = L(\lambda)\vec{x} + \vec{h}(\vec{x}, \lambda) \quad (4.4)$$

unde $L(\lambda)$ este operatorul liniarizat, iar $\vec{h}(\vec{x}, \lambda)$ este termenul neliniar. Pentru perturbații mici (deci suficient de aproape de punctul fix), termenul neliniar poate fi neglijat, iar evoluția perturbației este descrisă de ecuația liniară

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = L(\lambda)\vec{x} \quad (4.5)$$

Ecuația (4.5) constituie o problemă de vectori și valori proprii. Soluțiile acesteia sînt de forma

$$\vec{x} = \sum_{k=1}^n c_k \vec{u}_k e^{\omega_k t} \quad (4.6)$$

unde $\vec{u}_k$ sînt vectorii proprii, iar ω_k valorile proprii corespunzătoare. Cu n s-a notat dimensiunea sistemului dinamic. În general, valorile proprii sînt complexe

$$\omega = \omega_r \pm i\omega_i \quad (4.7)$$

Ținînd cont de (4.6) și (4.7), rezultă că starea staționară trece de la stabilitate ($\omega_r < 0$) la instabilitate ($\omega_r > 0$) pentru

$$\omega_r = 0 \quad (4.8)$$

numită condiția de stabilitate marginală.

În domeniul de instabilitate ($\omega_r > 0$), ecuația liniarizată (4.5) devine inadecvată, deoarece, în acord cu (4.6), prezice soluții care tind la infinit. Pentru a cerceta existența unor soluții acceptabile fizic, care apar dincolo de pragul de instabilitate, trebuie analizată ecuația neliniară, (4.4). Presupunem că există o valoare critică a parametrului de control, $\lambda = \lambda_C$, încît operatorul liniarizat $L(\lambda_C)$ admite o valoare proprie cu partea reală nulă, $\text{Re } \omega_C = 0$. În consecință, ecuația (4.5) admite în $\lambda = \lambda_C$ o soluție de forma

$$\vec{x} = \vec{u} e^{i(\text{Im } \omega_C)t} = \vec{u} e^{i\Omega_C t} \quad (4.9)$$

Înlocuind (4.9) în (4.5), se obține

$$i\Omega_C \vec{u} e^{i\Omega_C t} = L(\lambda_C) \vec{u} e^{i\Omega_C t}$$

de unde rezultă că

$$[i\Omega_C I - L(\lambda_C)] \cdot \vec{u} = 0 \quad (4.10)$$

I fiind matricea unitate de ordinul n . Studiăm comportarea soluției ecuației neliniare (4.4) în vecinătatea lui λ_C . Sînt valabile rezultatele [3]:

Teorema 1

Dacă $\vec{x} = 0$ rămîne soluție a ecuației neliniare (4.4) într-o vecinătate a lui λ_C și ω_C este o valoare proprie simplă, atunci $\lambda = \lambda_C$ este un punct de bifurcație: există cel puțin o nouă ramură a soluțiilor plecînd din $(\vec{x} = 0, \lambda = \lambda_C)$.

Teorema 2

Dacă ω_C este o valoare proprie simplă și este satisfăcută condiția de transversalitate

$$\left[\frac{d}{d\lambda} \operatorname{Re} \omega(\lambda) \right]_{\lambda=\lambda_C} \neq 0 \quad (4.11)$$

garantînd că $\operatorname{Re} \omega(\lambda)$ intersectează axa λ în $\lambda = \lambda_C$, atunci soluțiile care bifurcă vor fi staționare pentru $\Omega_C = 0$ și periodice în timp dacă $\Omega_C \neq 0$ (în acest caz, are loc o bifurcație Hopf).

4.2. Dezvoltarea soluțiilor în serii de perturbații**4.2.1. Cazul valorii proprii zero, $\operatorname{Re} \omega_C = \operatorname{Im} \omega_C = 0$**

Introducem un parametru mic suplimentar ε , în raport cu care dezvoltăm perturbația $\bar{x}$ și abaterea $\lambda - \lambda_C$

$$\bar{x} = \varepsilon \bar{x}_1 + \varepsilon^2 \bar{x}_2 + \dots \quad (4.12)$$

$$\lambda - \lambda_C = \varepsilon \gamma_1 + \varepsilon^2 \gamma_2 + \dots \quad (4.13)$$

Introducem scalele de timp $\tau_1, \tau_2, \dots$ prin

$$\frac{d}{dt} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial \tau_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial \tau_2} + \dots \quad (4.14)$$

Numim (4.12)-(4.14) dezvoltarea perturbativă multiscală [3]. Înlocuind aceste dezvoltări în ecuația neliniară (4.4), obținem

$$\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial \tau_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial \tau_2} + \dots \right) (\varepsilon \bar{x}_1 + \varepsilon^2 \bar{x}_2 + \dots) = \left[L(\lambda_C) + \frac{dL}{d\lambda} \Big|_{\lambda_C} (\varepsilon \gamma_1 + \varepsilon^2 \gamma_2 + \dots) \right] \cdot (\varepsilon \bar{x}_1 + \varepsilon^2 \bar{x}_2 + \dots) + \frac{1}{2} \frac{d^2 \bar{h}}{d\bar{x}^2} (\varepsilon \bar{x}_1 + \varepsilon^2 \bar{x}_2 + \dots) (\varepsilon \bar{x}_1 + \varepsilon^2 \bar{x}_2 + \dots) + \dots \quad (4.15)$$

Se observă că, în dezvoltarea lui $\bar{h}$, apar doar termeni neliniari în perturbația $\bar{x}$. Separînd în (4.15) coeficienții diverselor puteri ale lui ε , problema neliniară inițială,

(4.4), este înlocuită cu un sistem infinit de ecuații liniare în perturbații. Păstrând termenii de ordinul I și al II-lea în ε , ecuația (4.15) conduce la

$$\varepsilon^2 \frac{\partial \bar{x}_1}{\partial \tau_1} = \varepsilon L(\lambda_C) \bar{x}_1 + \varepsilon^2 L(\lambda_C) \bar{x}_2 + \varepsilon^2 \frac{dL}{d\lambda} \Big|_{\lambda_C} \gamma_1 \bar{x}_1 + \frac{1}{2} \varepsilon^2 \frac{d^2 \bar{h}}{d\bar{x}^2} \bar{x}_1 \bar{x}_1 \quad (4.16)$$

În ordinul I al lui ε , se obține

$$L(\lambda_C) \bar{x}_1 = 0 \quad (4.17)$$

În ordinul al doilea

$$L(\lambda_C) \bar{x}_2 = -\gamma_1 \frac{dL}{d\lambda} \Big|_{\lambda_C} \bar{x}_1 - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \bar{h}}{\partial \bar{x}^2} \bar{x}_1 \bar{x}_1 + \frac{\partial \bar{x}_1}{\partial \tau_1} \quad (4.18)$$

Deoarece $\omega_C = 0$, în acord cu (4.6), soluția problemei liniare (4.17) este de forma

$$\bar{x}_1 = c(\tau_1, \tau_2, \dots) \bar{u} \quad (4.19)$$

unde $\bar{u}$ este vector propriu. Mărimea

$$z = \varepsilon c \quad (4.20)$$

constituie amplitudinea perturbației.

4.2.2. Bifurcația transcritică

Pornind de la (4.18), se ajunge la ecuația amplitudinii [3]

$$\frac{dz}{dt} = (\lambda - \lambda_C) a_1 z - a_2 z^2 \quad (4.21)$$

unde a_1 și a_2 sînt constante. Dacă $a_2 \neq 0$, ecuația (4.21) admite două puncte fixe

$$z_{01} = 0 \text{ și } z_{02} = (\lambda - \lambda_C) \frac{a_1}{a_2} \quad (4.22)$$

Studiem stabilitatea acestora. Valoarea proprie asociată este

$$\omega(\lambda_C) = (\lambda - \lambda_C) a_1 - 2a_2 z_0 \quad (4.23)$$

Pentru prima stare staționară, valoarea proprie este

$$\omega_1(\lambda_C) = (\lambda - \lambda_C) a_1 \quad (4.24)$$

Rezultă că

$$- \text{dacă } a_1 > 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 > 0 \text{ pentru } \lambda > \lambda_C \\ \omega_1 < 0 \text{ pentru } \lambda < \lambda_C \end{cases}$$

- dacă $a_1 < 0$, semnul valorii proprii se inversează.

Înlocuind valoarea lui z_{02} din (4.22) în (4.23), se obține că, pentru această stare staționară, valoarea proprie este

$$\omega_2(\lambda_C) = -(\lambda - \lambda_C)a_1 \quad (4.25)$$

Ca urmare, stabilitatea este inversată față de starea staționară 1. Rezultatele de mai sus sînt sintetizate în diagramele de bifurcație din fig. 4.1 a și b. Liniile continue corespund stărilor staționare stabile, iar cele discontinue stărilor instabile. Deoarece în punctul de bifurcație, $\lambda = \lambda_C$, cele două stări staționare își inversează stabilitatea, *bifurcația transcritică* se mai numește și ‘cu schimb de stabilitate’.

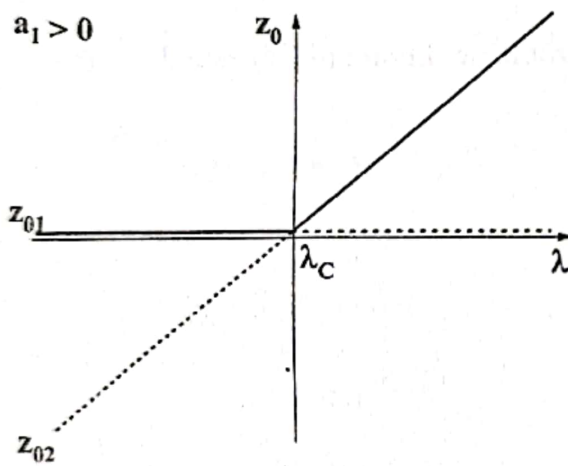


Fig. 4.1 a

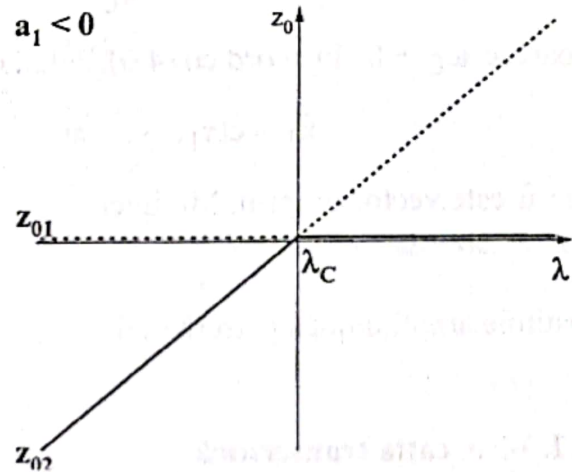


Fig. 4.1 b

Aplicația 4.1

Considerăm ecuația de evoluție [5]

$$\dot{x} = x - rx(1 - x) \quad (4.26)$$

Determinați stările staționare ale sistemului, studiați stabilitatea acestora și trasați diagrama de bifurcație funcție de parametrul de control r .

Rezolvare

Ecuația (4.26) admite stările staționare

$$x_{01} = 0$$

pentru orice valoare a parametrului de control și

$$x_{02} = 1 - \frac{1}{r}$$

care există pentru $r \neq 0$. Valoarea proprie asociată este

$$\omega = 1 - r + 2rx_0 \quad (4.27)$$

Pentru starea staționară 1, $\omega_1 = 1 - r$, care este pozitivă pentru $r < 1$ și negativă pentru $r > 1$. Pentru starea staționară 2, $\omega_2 = r - 1$, iar domeniile de stabilitate și instabilitate sînt inversate față de starea staționară 1. Diagrama de bifurcație este prezentată în fig. 4.2. În $r = 1$ are loc o bifurcație transcritică.

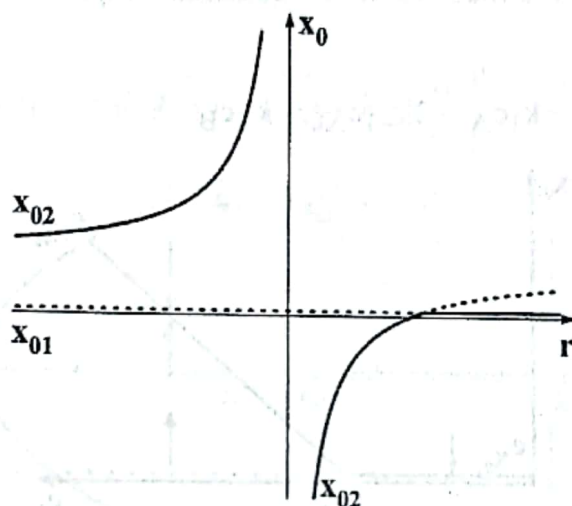


Fig. 4.2

Aplicația 4.2

Considerăm transformările chimice [5]



Scrieți ecuația cinetică, determinați stările staționare și analizați stabilitatea acestora. Trasați diagrama de bifurcație funcție de parametrul de control c_A .

Rezolvare

Ecuația cinetică corespunzătoare reacțiilor (4.28) este

$$\frac{dc_X}{dt} = k_1 c_A c_X - k_{-1} c_X^2 - k_2 c_X c_B \quad (4.29)$$

Aceasta admite starea staționară $c_{X01} = 0$, pentru orice valoare a parametrului de control. Starea staționară

$$c_{X02} = \frac{k_1 c_A - k_2 c_B}{k_{-1}} \quad (4.30)$$

există doar pentru

$$c_A > (c_A)_{cr} = \frac{k_2 c_B}{k_1}$$

deoarece concentrația intermediarului X trebuie să fie pozitivă. Valoarea proprie, în acord cu (4.29), este

$$\omega = k_1 c_A - 2k_{-1} c_{X0} - k_2 c_B \quad (4.31)$$

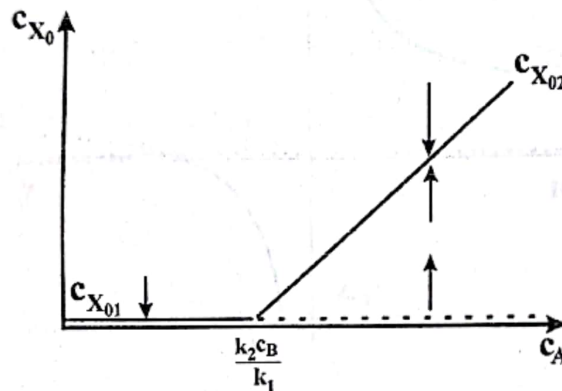


Fig. 4.3

Pentru starea staționară 1, valoarea proprie este

$$\omega_1 = k_1 c_A - k_2 c_B$$

Pentru starea staționară 2, valoarea proprie este

$$\omega_2 = -\omega_1$$

În funcție de valoarea parametrului de control, sînt posibile situațiile:

- $c_A < (c_A)_{cr}$, starea staționară 1 este stabilă. Sistemul tinde către starea staționară în care concentrația intermediarului X se anulează.
- La creșterea parametrului de control, $c_A > (c_A)_{cr}$, această stare staționară devine instabilă, iar starea staționară 2, nou apărută, este stabilă. În $c_A = (c_A)_{cr}$, are loc o bifurcație transcritică (fig. 4.3). Instabilitatea stării staționare 1 dincolo de punctul de bifurcație se datorează, în acest caz, pasului autocatalitic.

4.2.3. Bifurcația furcă

Analiza precedentă nu este valabilă pentru $a_2 = 0$. În acest caz, ecuația pentru amplitudine este

$$\frac{dz}{dt} = (\lambda - \lambda_C) a_1 z - a_3 z^3 \quad (4.32)$$

Pentru $a_3 \neq 0$, ecuația admite trei puncte fixe

$$z_{01} = 0 \text{ și } z_{02,3} = \pm \left[(\lambda - \lambda_C) \frac{a_1}{a_3} \right]^{1/2} \quad (4.33)$$

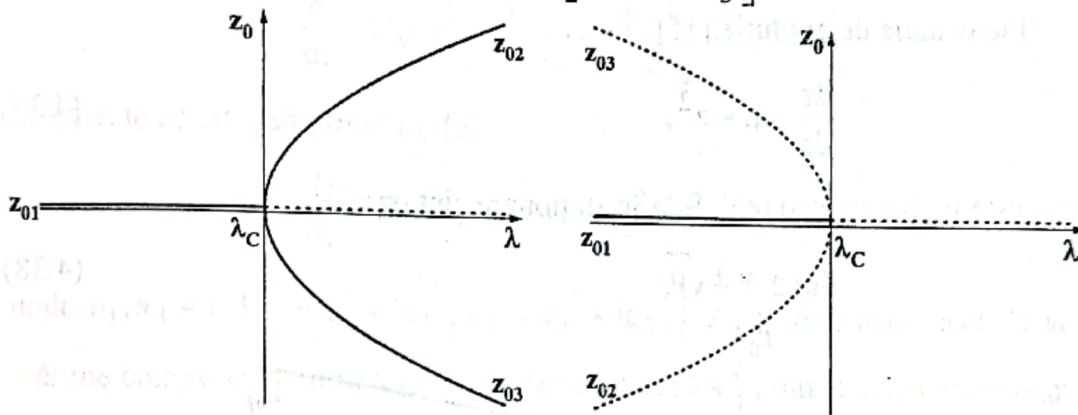


Fig. 4.4 a

Fig. 4.4 b

Pentru două dintre ramurile care bifurcă, amplitudinea crește cu radicalul distanței față de punctul de bifurcație, $(\lambda - \lambda_C)^{1/2}$. Starea staționară 1 există pentru orice valoare a parametrului de control λ și a parametrilor a_1 și a_3 . Stările staționare 2 și 3 există dacă $a_1/a_3 > 0, \lambda > \lambda_C$ sau $a_1/a_3 < 0, \lambda < \lambda_C$. Valoarea proprie asociată stărilor staționare este, conform cu (4.32)

$$\omega = (\lambda - \lambda_C) a_1 - 3 a_3 z_0^2 \quad (4.34)$$

Pentru starea staționară 1, valoarea proprie este

$$\omega_1 = (\lambda - \lambda_C) a_1 \quad (4.35)$$

Pentru stările staționare 2 și 3, valoarea proprie este

$$\omega_2 = \omega_3 = -2 a_1 (\lambda - \lambda_C) \quad (4.36)$$

Presupunem că $a_1 > 0$. Rezultă că:

$$\text{- dacă } a_3 > 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 > 0, \omega_{2,3} < 0 \text{ pentru } \lambda > \lambda_C \\ \omega_1 < 0 \text{ pentru } \lambda < \lambda_C \end{cases} \text{ (fig. 4.4 a);}$$

Ramurile care bifurcă sînt stabile și bifurcația se numește *supercritică*.

- dacă $a_3 < 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 > 0, \text{ pentru } \lambda > \lambda_C \\ \omega_1 < 0, \omega_{2,3} > 0 \text{ pentru } \lambda < \lambda_C \end{cases}$ (fig. 4.4 b);

În acest caz (fig. 4.4 b), ramurile care bifurcă sînt instabile și bifurcația se numește *subcritică*. Stările staționare instabile nu sînt accesibile sistemului. Acesta le părăsește și tinde la un nou atractor, sau diverge la infinit (comportament exploziv).

4.2.4. Bifurcația nod-șea

Fie ecuația de evoluție [15]

$$\frac{dz}{dt} = \mu - z^2, \quad (4.37)$$

unde μ este un parametru real. Stările staționare sînt date de

$$z_{01,2} = \pm\sqrt{\mu} \quad (4.38)$$

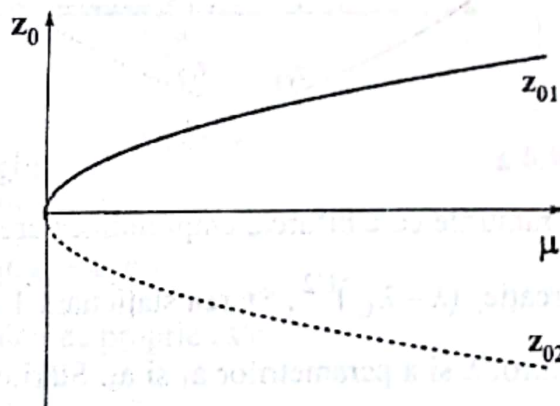


Fig. 4.5

Valoarea proprie asociată este

$$\omega = -2z_0 \quad (4.39)$$

$z_{01} = \sqrt{\mu} \Rightarrow \omega_1 = -2\sqrt{\mu} < 0$, soluția este stabilă;

$z_{02} = -\sqrt{\mu} \Rightarrow \omega_2 = 2\sqrt{\mu} > 0$, soluția este instabilă (fig. 4.5).

Pentru $\mu < 0$, sistemul nu admite nici o stare staționară. În $\mu = 0$ apare o pereche de stări staționare, dintre care una stabilă și una instabilă, într-o *bifurcație nod-șea*.

4.2.5. Bifurcația Hopf

La valoarea critică a parametrului de control $\lambda = \lambda_C$, partea imaginară Ω_C a valorii proprii ω_C a operatorului liniarizat L este nenulă. Conform (4.9), în $\lambda = \lambda_C$, $\bar{x}$ variază periodic după o scară de timp rapidă, dată de $2\pi/\Omega_C$. Soluția problemei liniare (4.17) este de forma

$$\bar{x}_1 = c(\tau_1, \tau_2, \dots) \bar{u} e^{i\Omega_C t} \quad (4.40)$$

Dezvoltarea multiscală va lua forma

$$\frac{d}{dt} = \Omega_C \frac{\partial}{\partial T} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \tau_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial \tau_2} + \dots \quad (4.41)$$

Se găsește ecuația amplitudinii [3]

$$\frac{dz}{dt} = (\lambda - \lambda_C) a_1 z - a_3 |z|^2 z \quad (4.42)$$

unde $a_1, a_3 \in \mathbb{C}$ ($a_1 = a_1' + ia_1''$; $a_3 = a_3' + ia_3''$). Amplitudinea z este, în acest caz, o mărime complexă. Pentru a găsi soluția ecuației (4.42), introducem coordonate polare

$$z = r e^{i\phi} \quad (4.43)$$

Înlocuind (4.43) în (4.42) și separînd părțile reale și imaginare, obținem

$$\begin{cases} \frac{dr}{dt} = (\lambda - \lambda_C) a_1' r - a_3' r^3 \\ \frac{d\phi}{dt} = (\lambda - \lambda_C) a_1'' - a_3'' r^2 \end{cases} \quad (4.44)$$

În $\lambda = \lambda_C$, r suferă bifurcația de la soluția banală $r_{01} = 0$ la soluția nebanală (coordonata r poate lua doar valori pozitive)

$$r_{02} = \left[\frac{(\lambda - \lambda_C) a_1'}{a_3'} \right]^{1/2} \quad (4.45)$$

care se extinde în domeniul $\lambda > \lambda_C$ dacă $a_1'/a_3' > 0$ și în domeniul $\lambda < \lambda_C$ dacă $a_1'/a_3' < 0$.

Pentru prima ecuație (4.44), valoarea proprie asociată stărilor staționare este

$$\omega = (\lambda - \lambda_C) a_1' - 3a_3' r_0^2 \quad (4.46)$$

Pentru soluția banală, $r_{01} = 0$

$$\omega_1 = (\lambda - \lambda_C) a_1' \quad (4.47)$$

Pentru soluția nebanală, dată de (4.45), valoarea proprie este

$$\omega_2 = -2(\lambda - \lambda_C) a_1' \quad (4.48)$$

Presupunem că $a_1' > 0$. Rezultă că

$$\text{- dacă } a_3' > 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 > 0, \omega_2 < 0 \text{ pentru } \lambda > \lambda_C \\ \omega_1 < 0 \text{ pentru } \lambda < \lambda_C \end{cases} \quad (\text{fig. 4.6 a});$$

$$\text{- dacă } a_3' < 0 \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 > 0, \text{ pentru } \lambda > \lambda_C \\ \omega_1 < 0, \omega_2 > 0 \text{ pentru } \lambda < \lambda_C \end{cases} \quad (\text{fig. 4.6 b});$$

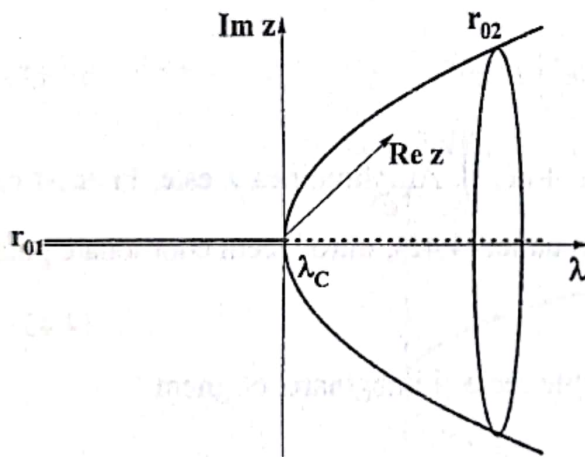


Fig. 4.6 a

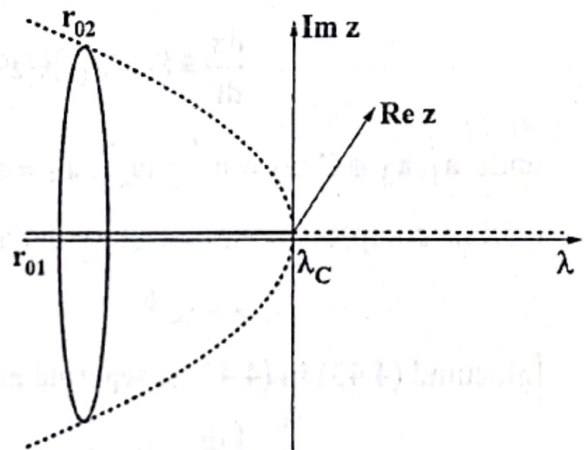


Fig. 4.6 b

Pentru timpi lungi, a doua ecuație din (4.44) devine

$$\frac{d\phi}{dt} = (\lambda - \lambda_C) a_1'' - a_3'' r_0^2$$

de unde

$$\phi = \phi_0 + \left(a_1'' - \frac{a_3'' a_1'}{a_3} \right) (\lambda - \lambda_C) t = \phi_0 + \Delta\Omega t \quad (4.49)$$

Ținând cont de (4.40) și (4.49), rezultă că frecvența $\Delta\Omega$ a oscilațiilor lui z corectează valoarea lui Ω_C cu termeni de ordinul $(\lambda - \lambda_C)$. În spațiul fazelor $(\text{Im } z, \text{Re } z)$, traiectoriile spiralează spre curba invariantă $|z| = r_S$, numită ciclu limită.

Aplicația 4.3

Considerăm sistemul [11]

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -x_2 + x_1(\lambda - x_1^2 - x_2^2) \\ \dot{x}_2 = x_1 + x_2(\lambda - x_1^2 - x_2^2) \end{cases} \quad (4.50)$$

Realizați analiza liniară de stabilitate a punctelor fixe și trasați diagrama de bifurcație în funcție de parametrul de control λ .

Rezolvare

Singura stare staționară a sistemului este $(0,0)$. Ecuația caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} \lambda - \omega & -1 \\ 1 & \lambda - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (4.51)$$

Valorile proprii asociate stării staționare sînt

$$\lambda \pm i \quad (4.52)$$

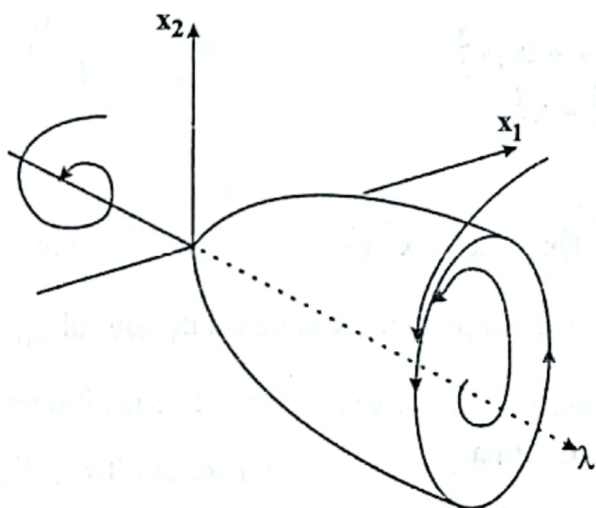


Fig. 4.7

Starea staționară va fi stabilă pentru $\lambda < 0$ și instabilă pentru $\lambda > 0$. Trecem în ecuațiile de evoluție (4.50) la coordonate polare

$$\begin{cases} x_1 = \rho \cos \theta \\ x_2 = \rho \sin \theta \end{cases} \quad (4.53)$$

Înlocuind (4.53) în (4.50), se obține

$$\begin{cases} \dot{\rho} = \rho(\lambda - \rho^2) \\ \dot{\theta} = 1 \end{cases} \quad (4.54)$$

Pentru $\rho = \sqrt{\lambda}$ avem $\dot{\rho} = 0$. Avem deci o orbită periodică pentru $\lambda > 0$, cu

amplitudinea crescând ca $\sqrt{\lambda}$. Deoarece

$$\begin{cases} \dot{\rho} < 0 & \text{pentru } \rho > \sqrt{\lambda} \\ \dot{\rho} > 0 & \text{pentru } \rho < \sqrt{\lambda} \end{cases} \quad (4.55)$$

orbita este stabilă (fig. 4.7).

În $\lambda_C = 0$ există un schimb de stabilitate de la starea staționară stabilă la ciclu limită stabil. Ciclu limită înconjoară starea staționară instabilă, cu o amplitudine crescând cu $(\lambda - \lambda_C)^{1/2}$. O astfel de bifurcație, de la starea staționară la oscilații periodice, se numește *bifurcație Hopf*. Jacobianul, evaluat în punctul de bifurcație, are o pereche de valori proprii pur imaginare.

Aplicația 4.4

Găsiți condiția de apariție a unei bifurcații Hopf pentru sistemele [12]:

$$\begin{aligned} \text{a)} \quad & \begin{cases} \dot{x}_1 = \lambda x_1 + x_2 + x_1 x_2 + a x_1 x_2^2 \\ \dot{x}_2 = -x_1 + \lambda x_2 - x_1^2 + x_2^2 \end{cases} \\ \text{b)} \quad & \begin{cases} \dot{x}_1 = x_1 + x_2 \\ \dot{x}_2 = (\lambda - 2)x_1 + (\lambda - 1)x_2 - x_1^3 - x_1^2 x_2 \end{cases} \end{aligned}$$

pentru starea staționară $(0,0)$. λ reprezintă parametrul de control.

Rezolvare

a) Ecuația caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} \lambda - \omega & 1 \\ -1 & \lambda - \omega \end{vmatrix} = 0$$

care are rădăcinile

$$\omega_{1,2} = \lambda \pm i$$

În $\lambda = 0$, sistemul suferă o bifurcație Hopf.

b) Ecuația caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} 1 - \omega & 1 \\ \lambda - 2 & \lambda - 1 - \omega \end{vmatrix} = 0$$

Valorile proprii sînt

$$\omega_{1,2} = \frac{\lambda \pm \sqrt{\lambda^2 - 4}}{2}$$

Acestea sînt complexe dac  $\lambda \in (-2, 2)$.  n $\lambda = 0$, sistemul sufer  o bifurca ie Hopf.

Aplica ia 4.5

Consider m sistemul [14]

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = x_2 - x_1^3 + \mu x_1 \\ \dot{x}_2 = -x_1 \end{cases}$$

Determina i st rile sta ionare  i analiza i stabilitatea acestora. Ce tip de bifurca ie prezint  sistemul?

Rezolvare

Sistemul admite starea sta ionar  $(0, 0)$. Ecua ia caracteristic  are forma

$$\begin{vmatrix} \mu - \omega & 1 \\ -1 & -\omega \end{vmatrix} = 0$$

care are r d cinile

$$\omega_{1,2} = \frac{\mu \pm \sqrt{\mu^2 - 4}}{2}$$

 n $\mu = 0$, sistemul are o pereche de valori proprii pur imaginare. Pentru $\mu \in (-2, 0)$ starea sta ionar  este un focar stabil, iar pentru $\mu \in (0, 2)$ starea sta ionar  este un focar instabil. Ca urmare,  n $\mu = 0$ are loc o bifurca ie Hopf.

Aplica ia 4.6

Consider m sistemul ecua iilor de evolu ie

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -x_2 + x_1(x_1^2 + x_2^2)^{-1/2}(1 - x_1^2 - x_2^2) \\ \dot{x}_2 = x_1 + x_2(x_1^2 + x_2^2)^{-1/2}(1 - x_1^2 - x_2^2) \end{cases} \quad (4.56)$$

Demonstra i c  cercul unitate din planul (x_1, x_2) este un ciclu limit  stabil pentru sistemul (4.56).

Rezolvare

Trecem  n sistemul (4.56) la coordonate polare plane, cu ajutorul transform rii

$$\begin{cases} x_1 = \rho \cos \theta \\ x_2 = \rho \sin \theta \end{cases}$$

Cu aceasta, ecuațiile de evoluție (4.56) devin

$$\begin{cases} \dot{\rho} \cos \theta - \rho \dot{\theta} \sin \theta = -\rho \sin \theta + (1 - \rho^2) \cos \theta \\ \dot{\rho} \sin \theta + \rho \dot{\theta} \cos \theta = \rho \cos \theta + (1 - \rho^2) \sin \theta \end{cases} \quad (4.57)$$

Înmulțim prima ecuație din (4.57) cu $\cos \theta$, a doua cu $\sin \theta$ și le adunăm. Se obține astfel ecuația de evoluție pentru coordonata radială

$$\dot{\rho} = 1 - \rho^2 \quad (4.58)$$

Înlocuind (4.58) în oricare dintre ecuațiile (4.57), se obține ecuația pentru coordonata angulară

$$\dot{\theta} = 1 \quad (4.59)$$

Separînd variabilele în ecuația (4.58) și integrînd, găsim că

$$\int_{\rho_0}^{\rho} \frac{d\rho}{1 - \rho^2} = \int_0^t dt$$

De aici rezultă că

$$\ln \left| \frac{\rho - 1}{\rho + 1} \right| = \ln \left| \frac{\rho_0 - 1}{\rho_0 + 1} \right| - 2t \quad (4.60)$$

Ca urmare, dependența de timp a coordonatei radiale este dată de

$$\rho = \frac{(\rho_0 + 1) + (\rho_0 - 1)e^{-2t}}{(\rho_0 + 1) - (\rho_0 - 1)e^{-2t}} \quad (4.61)$$

În acord cu (4.61), raza tinde asimptotic la 1

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \rho = 1 \quad (4.62)$$

Soluția ecuației (4.59) este de forma

$$\theta = \theta_0 + t \quad (4.63)$$

În conformitate cu (4.62) și (4.63), punctul fazic se rotește cu viteză unghiulară constantă și converge la cercul de rază unitate, care este un ciclu limită pentru sistemul considerat.

Aplicația 4.7

Considerăm sistemul ecuațiilor de evoluție [11]

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -x_2 + x_1(x_1^2 + x_2^2 - 1) \\ \dot{x}_2 = x_1 + x_2(x_1^2 + x_2^2 - 1) \end{cases} \quad (4.64)$$

Demonstrați că orbita periodică este instabilă.

Rezolvare

Sistemul (4.64) admite ca punct fix originea planului fazic. Ecuația caracteristică asociată este

$$\begin{vmatrix} -1-\omega & -1 \\ 1 & -1-\omega \end{vmatrix} = 0$$

cu rădăcinile

$$\omega_{1,2} = \frac{-2 \pm i\sqrt{6}}{2}$$

Rezultă că originea este un focar stabil, deci va atrage toate traiectoriile fazice din vecinătatea sa. Trecând la coordonate polare plane în (4.64), se obține că

$$\begin{cases} \dot{\rho} \cos \theta - \rho \dot{\theta} \sin \theta = -\rho \sin \theta + \rho(\rho^2 - 1) \cos \theta \\ \dot{\rho} \sin \theta + \rho \dot{\theta} \cos \theta = \rho \cos \theta + \rho(\rho^2 - 1) \sin \theta \end{cases} \quad (4.65)$$

Din ecuațiile (4.65), se obține

$$\begin{cases} \dot{\rho} = \rho(\rho^2 - 1) \\ \dot{\theta} = 1 \end{cases} \quad (4.66)$$

Soluțiile acestora sînt de forma

$$\begin{cases} \rho^2 = \frac{\rho_0^2}{\rho_0^2 + (1 - \rho_0^2)e^{2t}} \\ \theta = \theta_0 + t \end{cases} \quad (4.67)$$

Din prima ecuație (4.67) rezultă că

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \rho = 0$$

dacă $\rho_0 < 1$. Dacă condiția inițială este astfel încît $\rho_0 > 1$, din prima ecuație (4.67)

rezultă că, pentru

$$t \rightarrow \frac{1}{2} \ln \left(\frac{\rho_0^2}{\rho_0^2 - 1} \right)$$

raza diverge la infinit. Deci orbita periodică ($\rho = 1, 0$) este instabilă.

Aplicația 4.8

Considerăm ecuațiile de evoluție

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -x_2 + x_1(\lambda + x_1^2 + x_2^2) \\ \dot{x}_2 = x_1 + x_2(\lambda + x_1^2 + x_2^2) \end{cases} \quad (4.68)$$

Demonstrați că sistemul (4.68) prezintă o bifurcație Hopf subcritică, la variația parametrului de control λ .

Rezolvare

Sistemul (4.68) admite ca punct fix originea planului fazic. Ecuația caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} \lambda - \omega & -1 \\ 1 & \lambda - \omega \end{vmatrix} = 0$$

iar rădăcinile acesteia sînt

$$\omega_{1,2} = \lambda \pm i$$

Rezultă că în $\lambda = 0$ are loc tranziția de la focar stabil ($\lambda < 0$) la focar instabil ($\lambda > 0$).

Trecînd la coordonate polare în ecuațiile de evoluție (4.68) se obține că

$$\begin{cases} \dot{\rho} = \rho(\lambda + \rho^2) \\ \dot{\theta} = 1 \end{cases} \quad (4.69)$$

Pentru $\lambda > 0 \Rightarrow \dot{\rho} > 0$, și traiectoria fazică diverge oscilant la infinit. Pentru valori pozitive ale lui λ , nu există o traiectorie de tip ciclu limită.

Dacă parametrul de control λ este negativ, soluția primei ecuații (4.69) este

$$\rho^2 = \frac{\lambda \rho_0^2}{(\rho_0^2 + \lambda)e^{-2\lambda t} - \rho_0^2} \quad (4.70)$$

În funcție de condiția inițială ρ_0 , sînt posibile situațiile:

- dacă $\rho_0^2 < -\lambda \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} \rho^2 = 0$. Traiectoria fazică tinde oscilant la focarul stabil;

- dacă condiția inițială se află inițial în afara ciclului limită, $\rho_0^2 > -\lambda$, din (4.70) rezultă că ρ diverge la infinit pentru

$$t \rightarrow \frac{1}{2\lambda} \ln \left(\frac{\rho_0^2 + \lambda}{\rho_0^2} \right)$$

Rezultă că $(\rho = \sqrt{-\lambda}, \theta)$ este un ciclu limită instabil. În $\lambda = 0$ are loc o bifurcație Hopf subcritică. Pentru $\lambda > 0$, singura mulțime invariantă este starea staționară $(0,0)$, care este un focar instabil. Pentru $\lambda < 0$, starea staționară $(0,0)$ este focar stabil, iar ciclul limită $(\rho = \sqrt{-\lambda}, \theta)$ este instabil. Diagrama de bifurcație este reprezentată în fig. 4.6 b.

Aplicația 4.9

Considerăm un sistem dinamic a cărui comportament este descris, în coordonate polare plane, de sistemul ecuațiilor de evoluție [10]

$$\begin{cases} \dot{r} = ar + 2r^3 - r^5 = f(r) \\ \dot{\theta} = 1 \end{cases} \quad (4.71)$$

Ce bifurcații apar la modificarea parametrului de control a ?

Rezolvare

În sistemul (4.71), ecuațiile sînt decuplate. Folosind această proprietate, vom studia stabilitatea mulțimilor invariante utilizînd procedeul calitativ descris în paragraful 2.6. Condiția de staționaritate pentru coordonata radială este satisfăcută, în acord cu prima ecuație (4.71), dacă

$$r_0(a + 2r_0^2 - r_0^4) = 0 \quad (4.72)$$

Pentru orice valoare a parametrului de control a , sistemul admite starea staționară

$$r_{01} = 0$$

Celelalte stări staționare, dacă există, satisfac

$$a + 2r_0^2 - r_0^4 = 0 \quad (4.73)$$

Aceasta este o ecuație bipătratică și i se asociază ecuația de gradul al doilea

$$x^2 - 2x - a = 0 \quad (4.74)$$

Sînt posibile următoarele situații:

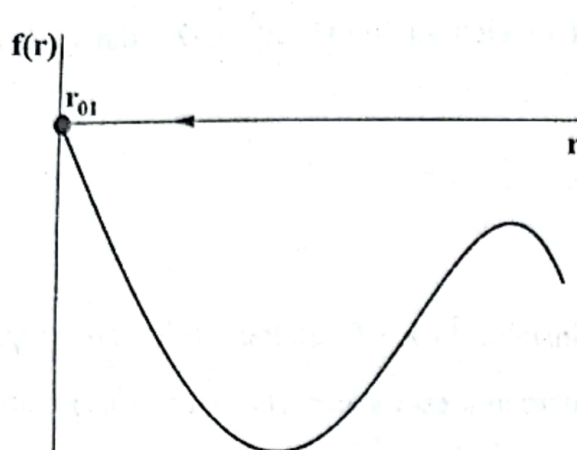


Fig. 4.8 a

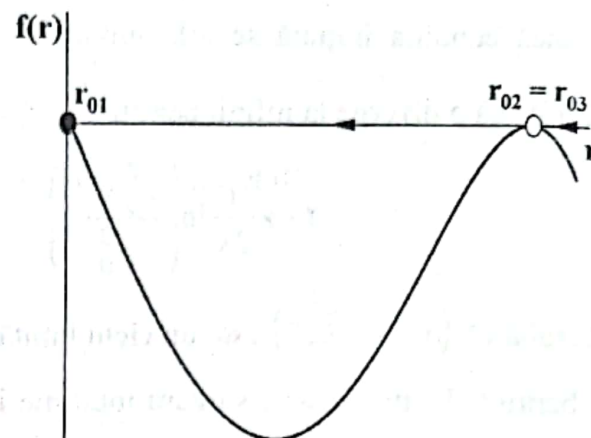


Fig. 4.8 b

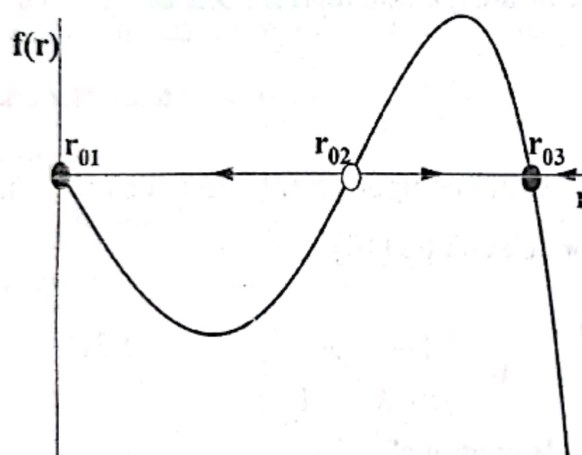


Fig. 4.8 c

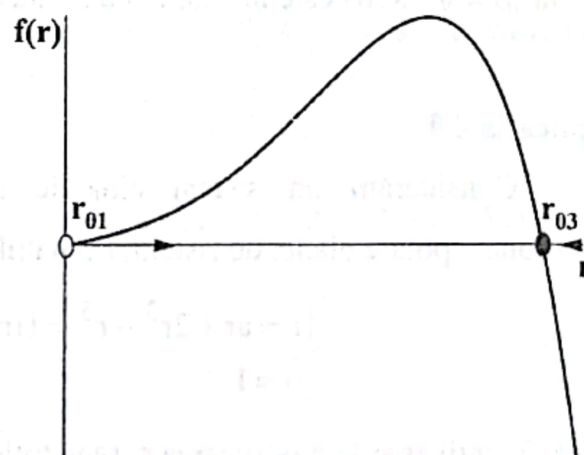


Fig. 4.8 d

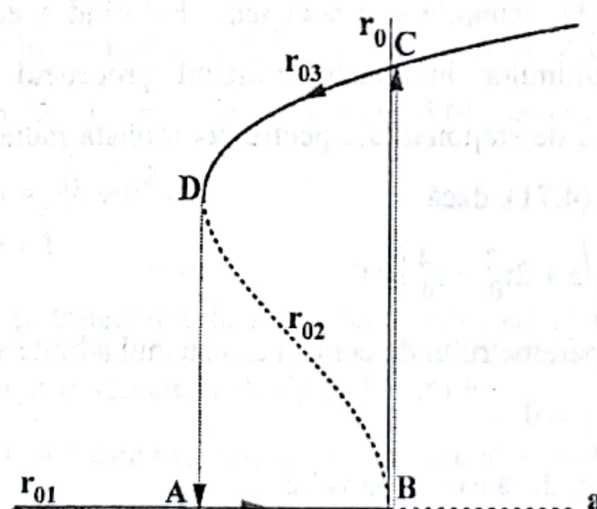


Fig. 4.8 e

a) $a < -1$, ecuația (4.74) nu are rădăcini reale. Ca urmare, singurul punct fix este originea planului fazelor. În fig. 4.8 a, este reprezentată funcția $f(r)$. Deoarece $f(r) < 0$ pentru orice valoare a lui r , starea staționară 1 este stabilă.

b) Pentru $a = -1$, în afară de starea staționară 1, condiția de staționaritate (4.73) mai admite rădăcina dublă $r_{02} = r_{03} = 1$. În conformitate cu fig. 4.8 b, originea este singurul attractor stabil.

c) Pentru $a \in (-1, 0)$, ecuația de evoluție pentru rază admite trei puncte fixe

$$\begin{cases} r_{01} = 0 \\ r_{02} = \sqrt{1 - \sqrt{1 + a}} \\ r_{03} = \sqrt{1 + \sqrt{1 + a}} \end{cases}$$

Așa cum se observă în fig. 4.8 c, starea staționară rămâne stabilă în acest domeniu al parametrului de control, dar apar, în plus, un ciclu limită instabil de amplitudine r_{02} și un ciclu limită stabil de amplitudine r_{03} . Ciclul limită stabil și starea staționară stabilă coexistă.

d) Pentru $a > 0$, pe lângă starea staționară 1, apare o singură stare staționară

$$r_{03} = \sqrt{1 + \sqrt{1 + a}}$$

În acord cu fig. 4.8 d, starea staționară 1 este instabilă, iar ciclul limită de amplitudine r_{03} este stabil. Figura 4.8 e prezintă diagrama de bifurcație a sistemului considerat.

În $a = 0$ are loc, la scăderea parametrului de control, o bifurcație Hopf subcritică. Datorită coexistenței unei stări staționare stabile și unui ciclu limită stabil în domeniul $a \in (-1, 0)$, sistemul prezintă un comportament histeretic. Presupunem că, inițial, $a < -1$. Sistemul se va afla în starea staționară 1. Crescând parametrul de control, în origine starea staționară 1 își pierde stabilitatea și, ca urmare, va avea loc un salt în C, pe un ciclu limită stabil de amplitudine r_{03} . Scăzând parametrul de control a , sistemul rămâne pe ciclul limită stabil, a cărui amplitudine scade după curba CD. În D, ciclul limită stabil se contopește cu cel instabil și dispar (proces asemănător cu cel de la bifurcația nod-șea a stărilor staționare). Ca urmare, sistemul face un salt pe starea staționară stabilă r_{01} , în A.

În bifurcațiile Hopf supercritice (fig. 4.6 a sau fig. 4.7), amplitudinea ciclului limită stabil crește gradat din punctul de bifurcație, unde este zero. Din acest motiv, bifurcația Hopf supercritică se mai numește, în special în inginerie, *bifurcație lină* (engl. 'soft'). În bifurcația subcritică, în origine, are loc un salt brusc, la modificarea parametrului de control, pe un ciclu limită de amplitudine finită. Bifurcațiile de acest

tip se numesc *bruște* (engl. 'hard').

Aplicația 4.10

Considerăm ecuația de evoluție [4]

$$\frac{dz}{dt} = a_1 z - a_3 z^3 - a_5 z^5 \quad (4.75)$$

unde parametrii reali $a_3 < 0$, $a_5 > 0$, iar a_1 joacă rolul de parametru de control. Determinați stările staționare ale sistemului și studiați stabilitatea acestora. Trasați diagrama de bifurcație.

Rezolvare

În acord cu (4.75), condiția de staționaritate conduce la

$$z_0 (a_1 - a_3 z_0^2 - a_5 z_0^4) = 0 \quad (4.76)$$

Pentru orice valoare a parametrilor, aceasta admite soluția banală,

$$z_{01} = 0 \quad (4.77)$$

Condiția de staționaritate (4.76) este satisfăcută și de valorile lui z_0 care satisfac

$$a_5 z_0^4 + a_3 z_0^2 - a_1 = 0 \quad (4.78)$$

Aceasta este o ecuație bipătratică și, cu notația

$$z_0^2 = y$$

se reduce la

$$a_5 y^2 + a_3 y - a_1 = 0 \quad (4.79)$$

Discriminantul acestei ecuații pătratice este

$$\Delta = a_3^2 + 4a_1a_5$$

a) Pentru

$$a_1 < -\frac{a_3^2}{4a_5}$$

ecuația (4.79) nu admite rădăcini reale și, în consecință, soluția banală este singura stare staționară a sistemului.

b) Pentru $-\frac{a_3^2}{4a_5} < a_1 < 0$, discriminantul ecuației (4.79) este pozitiv. Deoarece

$$\begin{cases} y_1 + y_2 = -\frac{a_3}{a_5} > 0 \\ y_1 y_2 = -\frac{a_1}{a_5} > 0 \end{cases} \quad (4.80)$$

ambele soluții ale ecuației (4.79) vor fi pozitive. Ca urmare, ecuația (4.75) admite patru puncte fixe nebanale

$$z_{02,3,4,5} = \pm \sqrt{\frac{-a_3 \pm \sqrt{\Delta}}{2a_5}} \quad (4.81)$$

c) Dacă $a_1 > 0$, produsul rădăcinilor ecuației (4.79) este negativ și suma acestora este pozitivă. Ca urmare, ecuația (4.76) admite doar două rădăcini nebanale

$$z_{02,3} = \pm \sqrt{\frac{-a_3 + \sqrt{\Delta}}{2a_5}} \quad (4.82)$$

Studiem stabilitatea stărilor staționare. În acord cu (4.75), valoarea proprie este

$$\omega = a_1 - 3a_3 z_0^2 - 5a_5 z_0^4 \quad (4.83)$$

Pentru starea staționară (4.77), valoarea proprie este

$$\omega = a_1$$

Rezultă că soluția banală a ecuației (4.76) este stabilă pentru $a_1 < 0$ și instabilă pentru $a_1 > 0$.

Ținând cont că soluțiile nebanale ale lui (4.76) satisfac ecuația (4.78), rezultă că valorile proprii corespunzătoare satisfac

$$\omega = -4a_1 + 2a_3 z_0^2 \quad (4.84)$$

b) Considerăm că $-\frac{a_3^2}{4a_5} < a_1 < 0$. Studiăm întâi stabilitatea punctelor fixe

$$z_{02,3} = \pm \sqrt{\frac{-a_3 + \sqrt{\Delta}}{2a_5}} \quad (4.85)$$

Înlocuind (4.85) în (4.84), se obține că

$$\omega_{2,3} = -4a_1 - \frac{a_3^2}{a_5} + \frac{a_3\sqrt{\Delta}}{a_5} < \frac{a_3^2}{a_5} - \frac{a_3^2}{a_5} + \frac{a_3\sqrt{\Delta}}{a_5} < 0 \quad (4.86)$$

În consecință, în acest interval al parametrului de control, stările staționare date de (4.85) sînt stabile. Considerăm punctele fixe

$$z_{03,4} = \pm \sqrt{\frac{-a_3 - \sqrt{\Delta}}{2a_5}} \quad (4.87)$$

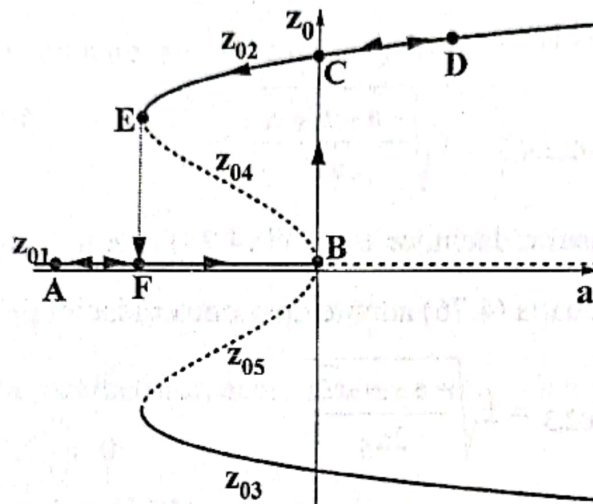


Fig. 4.9

Înlocuind (4.87) în (4.84), se obține că

$$\omega_{4,5} = -4a_1 - \frac{a_3^2}{a_5} - \frac{a_3\sqrt{\Delta}}{a_5} \quad (4.88)$$

Deoarece $a_1 < 0$, rezultă că

$$\omega_{4,5} > -\frac{a_3^2}{a_5} + \frac{a_3^2}{a_5} = 0$$

Ca urmare, punctele fixe date de (4.87) sînt instabile.

c) Dacă $a_1 > 0$, înlocuind (4.82) în (4.84), se obține că

$$\omega_{2,3} = -4a_1 - \frac{a_3^2}{a_5} + \frac{a_3\sqrt{\Delta}}{a_5}$$

Deoarece toți termenii sînt negativi, rezultă că stările staționare 2 și 3 sînt stabile.

Rezultatele de mai sus sînt sintetizate în diagrama de bifurcație din fig. 4.9. Aici, ramurile stabile z_{02} și z_{03} apar la o distanță finită de axa a_1 . În punctul B, are loc o

bifurcație furcă subcritică. Pentru o valoare a lui a_1 corespunzătoare punctului F, ramurile stabile z_{02} și z_{03} se contopesc cu ramurile instabile z_{04} , respectiv z_{05} . În domeniul FB, coexistă trei stări staționare stabile, z_{01} , z_{02} și z_{03} . Starea staționară z_{01} rămâne stabilă la perturbații de amplitudine finită și mai mică decât valoarea corespunzătoare a lui z_{04} . La o valoare mai mare a perturbației, sistemul face tranziția pe stările stabile z_{02} sau z_{03} . Spunem că starea staționară z_{01} , în domeniul FB, este *condițional stabilă*. Sistemul prezintă și comportament histeretic: în funcție de condiția inițială și sensul de parcurs, calea urmată poate fi diferită. Presupunem că inițial sistemul se află în starea A. La creșterea parametrului de control, sistemul ajunge în B. Aici, deoarece starea staționară 1 devine instabilă, sistemul suferă un salt în C (sau în punctul corespunzător de pe z_{03}). Crescând în continuare parametrul de control, este urmată calea CD. Presupunem că sistemul se află în D și parametrul de control a_1 este scăzut. Va fi urmată calea D-C-E-F-A. Punctul E se numește *punct de întoarcere*.

Aplicația 4.11

Trasați diagrama de bifurcație a sistemului

$$\dot{z} = -z(z^2 - 2bz - a) \quad (4.89)$$

în planul (a, z) știind că parametrul b este pozitiv, indicând soluțiile stabile.

Rezolvare

În funcție de valoarea parametrului de control a , sînt posibile situațiile:

- Dacă $a < -b^2$, $z_{01} = 0$ este singurul punct fix pentru (4.89).
- Dacă $a > -b^2$, în afară de $z_{01} = 0$, ecuația (4.89) mai admite punctele fixe

$$z_{02} = b + \sqrt{b^2 + a} \text{ și } z_{03} = b - \sqrt{b^2 + a} \quad (4.90)$$

În acord cu ecuația de evoluție (4.89), valorile proprii asociate stărilor staționare sînt

$$\omega = -3z_0^2 + 4bz_0 + a \quad (4.91)$$

Deoarece z_{02} și z_{03} sînt rădăcini ale ecuației

$$z_0^2 - 2bz_0 - a = 0$$

rezultă că valoarea proprie pentru stările staționare 2 și 3 poate fi scrisă

$$\omega = -2bz_0 - 2a \quad (4.92)$$

Pentru prima stare staționară, $z_{01} = 0$, din (4.91) rezultă că valoarea proprie este

$$\omega_1 = a \begin{cases} a > 0 \Rightarrow \text{stare staționară instabilă} \\ a < 0 \Rightarrow \text{stare staționară stabilă} \end{cases} \quad (4.93)$$

Pentru starea staționară 2, din (4.90) și (4.92), valoarea proprie este

$$\omega_2 = -2b^2 - 2b\sqrt{b^2 + a} - 2a \quad (4.94)$$

Deoarece această stare staționară există doar pentru $a > -b^2$, din (4.94) rezultă că $\omega_2 < 0$, deci starea staționară 2 este întotdeauna stabilă pe domeniul de existență.

Pentru starea staționară 3, din (4.90) și (4.92), valoarea proprie este

$$\omega_3 = -2b^2 + 2b\sqrt{b^2 + a} - 2a \quad (4.95)$$

Aceasta este pozitivă pe domeniul $a \in (-b^2, 0)$ și negativă pentru $a > 0$.

Rezultatele de mai sus sînt sintetizate în diagrama de bifurcație din fig. 4.10. În origine (punctul B) are loc o bifurcație transcritică în care stările staționare 1 și 3 fac schimb de stabilitate.

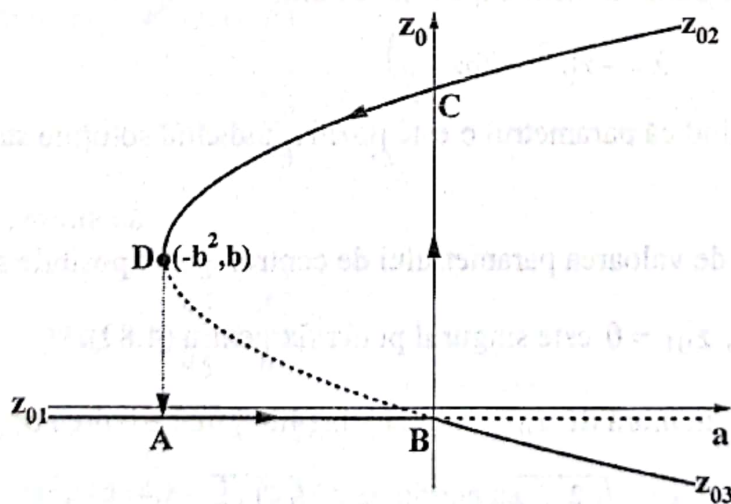


Fig. 4.10

În domeniul A-B-C-D-A, sistemul prezintă comportament histeretic.

Aplicația 4.12

Trasați diagrama de bifurcație pentru ecuația de evoluție [6]

$$\dot{z} = 2(a^2 - z^2) - (a^2 + z^2)^2 \quad (4.96)$$

în planul (a, z) .

Rezolvare

Condiția de staționaritate pentru ecuația (4.96) conduce la

$$z^4 + 2z^2(1 + a^2) + (a^4 - 2a^2) = 0 \quad (4.97)$$

Fiind o ecuație bipătratică, acesteia i se asociază ecuația de gradul al doilea

$$x^2 + 2x(1 + a^2) + (a^4 - 2a^2) = 0 \quad (4.98)$$

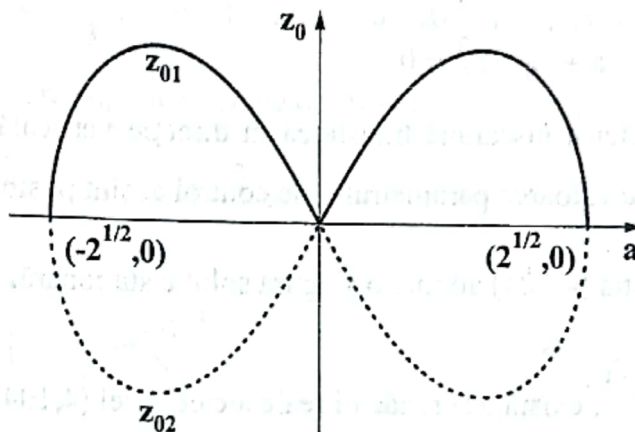


Fig. 4.11

Dintre rădăcinile acesteia, prezintă interes doar rădăcina care poate fi pozitivă

$$x = -1 - a^2 + \sqrt{1 + 4a^2} \quad (4.99)$$

Impunând condiția ca aceasta să fie pozitivă, se obține pentru parametrul de control condiția

$$a \in (-\sqrt{2}, \sqrt{2}) \quad (4.100)$$

În acest domeniu, sistemul admite două stări staționare

$$z_{01} = \sqrt{-1 - a^2 + \sqrt{1 + 4a^2}} \text{ și } z_{02} = -z_{01} \quad (4.101)$$

Din (4.96) rezultă că valoarea proprie este

$$\omega = -4z_0(z_0^2 + 1 + a^2) \quad (4.102)$$

Aceasta este negativă pentru starea staționară 1 și pozitivă pentru starea staționară 2.

Diagrama de bifurcație este prezentată în fig. 4.11. În $a = -\sqrt{2}$ și $a = \sqrt{2}$, apar puncte de întoarcere. În origine, are loc o bifurcație transcritică.

Aplicația 4.13

Fie ecuația de evoluție [12]

$$\dot{z} = a + z - z^3 \quad (4.103)$$

Trasați diagrama de bifurcație funcție de parametrul de control a .

Rezolvare

Considerăm graficul funcției $f(x) = x - x^3$, reprezentat în fig. 4.12 a. Condiția de staționaritate pentru ecuația (4.103) este

$$a + z_0 - z_0^3 = 0 \quad (4.104)$$

Adăugarea constantei a înseamnă translarea în direcție verticală a graficului din fig. 4.12 a. În funcție de valoarea parametrului de control a , sînt posibile situațiile:

- a) $a < -\frac{2\sqrt{3}}{9}$; ecuația (4.104) admite o singură soluție staționară, negativă;
- b) $a \in \left(-\frac{2\sqrt{3}}{9}, \frac{2\sqrt{3}}{9}\right)$; există trei rădăcini reale ale ecuației (4.104);
- c) $a > \frac{2\sqrt{3}}{9}$. Sistemul admite o singură stare staționară, pozitivă.

Derivînd (4.104) în raport cu parametrul de control a , se obține că

$$\frac{dz_0}{da} = \frac{1}{3z_0^2 - 1} \quad (4.105)$$

- a) $a < -\frac{2\sqrt{3}}{9} \Rightarrow z_{01} < -\frac{\sqrt{3}}{3} \Rightarrow \frac{dz_0}{da} > 0$, valoarea stării staționare crește cu parametrul de control.

- b) $a \in \left(-\frac{2\sqrt{3}}{9}, \frac{2\sqrt{3}}{9}\right)$. Cele trei stări staționare satisfac

$$z_{01} < -\frac{\sqrt{3}}{3} \Rightarrow \left(\frac{dz_0}{da}\right)_1 > 0, \text{ panta ramurii inferioare este pozitivă.}$$

$$-\frac{\sqrt{3}}{3} < z_{02} < \frac{\sqrt{3}}{3} \Rightarrow \left(\frac{dz_0}{da}\right)_2 < 0, \text{ panta ramurii intermediare este negativă.}$$

$$z_{03} > -\frac{\sqrt{3}}{3} \Rightarrow \left(\frac{dz_0}{da} \right)_3 > 0, \text{ panta ramurii superioare este pozitivă.}$$

$$\text{c) } a > \frac{2\sqrt{3}}{9} \Rightarrow z_{03} > \frac{\sqrt{3}}{3} \Rightarrow \frac{dz_0}{da} > 0.$$

Valoarea proprie asociată stărilor staționare este, în acord cu (4.103)

$$\omega = 1 - 3z_0^2 \quad (4.106)$$

Ținând cont că $z_{01} < -\frac{\sqrt{3}}{3}$, rezultă că $\omega_1 < 0$. Această condiție de stabilitate este valabilă și pentru ramura superioară, dată de z_{03} . Pentru ramura intermediară,

$$-\frac{\sqrt{3}}{3} < z_{02} < \frac{\sqrt{3}}{3} \Rightarrow \omega_2 > 0 \quad (4.107)$$

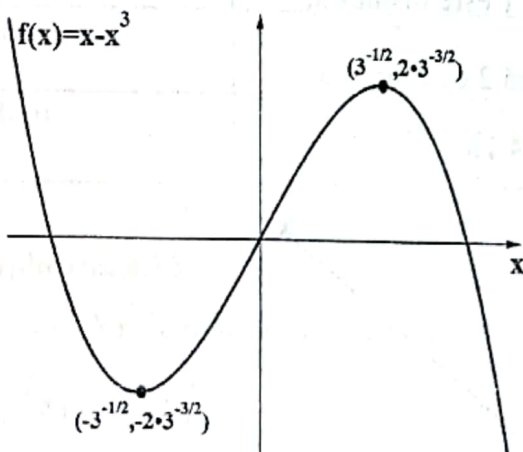


Fig. 4.12 a

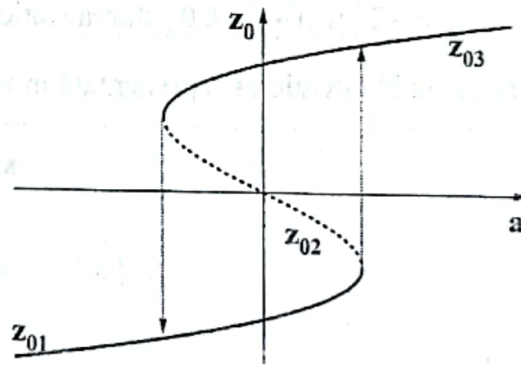


Fig. 4.12 b

Ca urmare, ramura intermediară este instabilă. Fig. 4.12 b prezintă diagrama de bifurcație pentru sistemul dinamic descris de ecuația de evoluție (4.103). Se observă că și acest sistem prezintă un comportament histeretic.

Aplicația 4.14

Considerăm ecuația de evoluție [14]

$$\dot{x} = 1 - 2(1 + \mu)x + x^2$$

Determinați stările staționare, realizați analiza liniară de stabilitate a acestora și trasați diagrama de bifurcație.

Rezolvare

Condiția de staționaritate pentru sistemul considerat este

$$x_0^2 - 2(1 + \mu)x_0 + 1 = 0$$

Pentru $\mu \in (-\infty, -2) \cup (0, \infty)$ există două stări staționare

$$\begin{cases} x_{01} = 1 + \mu + \sqrt{\mu(\mu + 2)} \\ x_{02} = 1 + \mu - \sqrt{\mu(\mu + 2)} \end{cases}$$

În $\mu = -2$ și $\mu = 0$, cele două stări staționare coincid. Valoarea proprie asociată stărilor staționare este

$$\omega = -2(1 + \mu) + 2x_0$$

de unde rezultă că

$\omega_1 = 2\sqrt{\mu(\mu + 2)} > 0$, starea staționară 1 este instabilă;

$\omega_2 = -2\sqrt{\mu(\mu + 2)} < 0$, starea staționară 2 este stabilă.

Diagrama de bifurcație este prezentată în fig. 4.13.

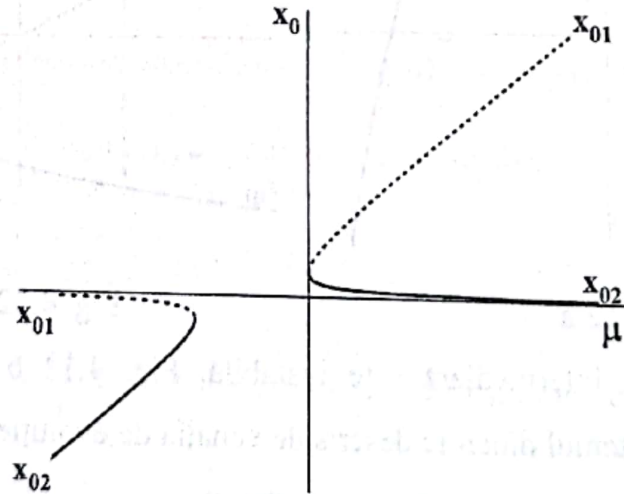


Fig. 4.13

În $\mu = -2$ și $\mu = 0$, sistemul prezintă bifurcații nod-șea.

4.3 Forma normală a bifurcațiilor

Forma normală a unei bifurcații reprezintă o ecuație sau un sistem de ecuații care aproximează dinamica sistemului în vecinătatea unui punct de bifurcație [6]. Dimensiunea formei normale este în general mai mică decât dimensiunea sistemului complet de ecuații ce descrie dinamica sistemului. Prezintă mai jos forma normală a bifurcațiilor generice ale punctelor fixe, bifurcații ce apar când un singur parametru de control este variat (numite bifurcații de codimensiune 1) [15].

Numele bifurcației	Formă normală pentru bifurcația supercritică	Formă normală pentru bifurcația subcritică
Nod-șea	$\dot{z} = \mu - z^2$	$\dot{z} = \mu + z^2$
Transcritică	$\dot{z} = \mu z - z^2$	$\dot{z} = \mu z + z^2$
Furcă	$\dot{z} = \mu z - z^3$	$\dot{z} = \mu z + z^3$
Hopf	$\dot{z} = (\mu + i\gamma)z - z z ^2$	$\dot{z} = (\mu + i\gamma)z + z z ^2$

Aplicația 4.15

Considerăm următoarele ecuații de evoluție [12]

$$a) \begin{cases} \dot{x}_1 = \lambda + x_1^2 \\ \dot{x}_2 = -x_2 \end{cases} \quad (4.108)$$

$$b) \begin{cases} \dot{x}_1 = -\lambda x_1 - x_1^3 \\ \dot{x}_2 = -x_2 \end{cases} \quad (4.109)$$

Determinați stările staționare și realizați analiza liniară de stabilitate. Trasați portretul fazic pentru fiecare dintre sisteme, pentru $\lambda < 0$, $\lambda = 0$ și $\lambda > 0$. Ce bifurcații au loc?

Rezolvare

a) Pentru $\lambda < 0$, sistemul (4.108) admite punctele fixe

$$\begin{cases} x_{01} = -\sqrt{-\lambda} \\ x_{02} = 0 \end{cases} \text{ și } \begin{cases} x_{01} = \sqrt{-\lambda} \\ x_{02} = 0 \end{cases} \quad (4.110)$$

În acord cu (4.108), ecuația caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} 2x_{01} - \omega & 0 \\ 0 & -1 - \omega \end{vmatrix} = 0$$

Valorile proprii sînt

$$\begin{cases} \omega_1 = 2x_{01} \\ \omega_2 = -1 \end{cases} \quad (4.111)$$

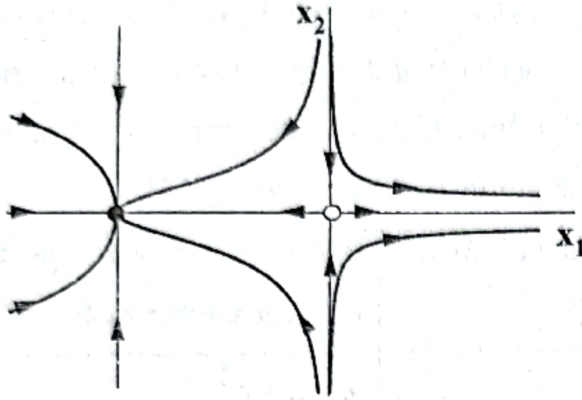


Fig. 4.14 a

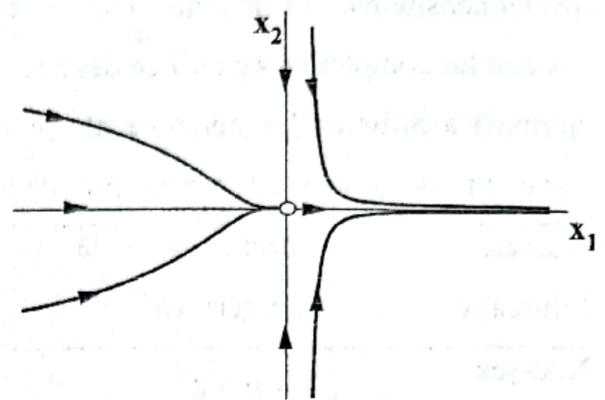


Fig. 4.14 b

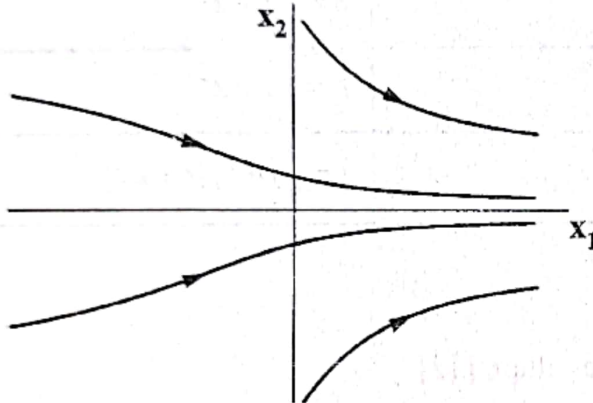


Fig. 4.14 c

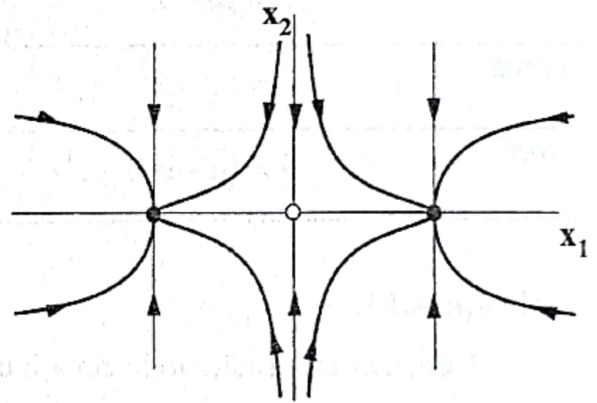


Fig. 4.15 a

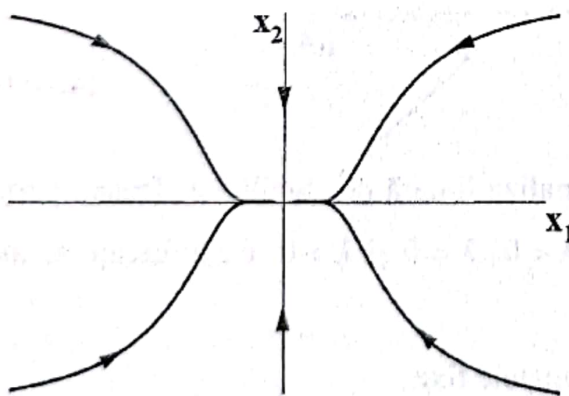


Fig. 4.15 b

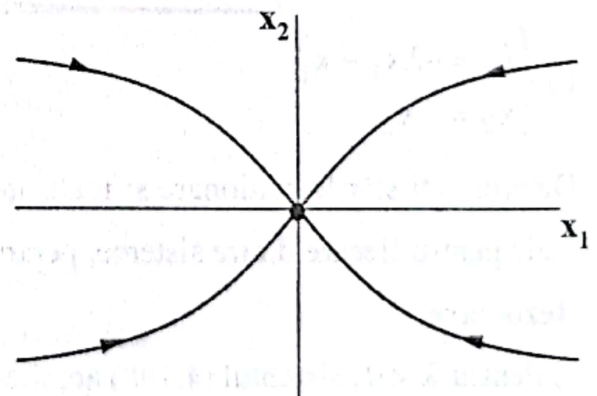


Fig. 4.15 c

Rezultă că starea staționară $\begin{cases} x_{01} = -\sqrt{-\lambda} \\ x_{02} = 0 \end{cases}$ este nod stabil, iar starea staționară

$\begin{cases} x_{01} = \sqrt{-\lambda} \\ x_{02} = 0 \end{cases}$ este punct șea: pe direcția x_2 are loc convergența traiectoriilor, iar pe

direcția x_1 are loc divergența acestora (fig. 4.14 a). Prima ecuație din sistemul (4.108) reprezintă forma normală a bifurcației nod-șea subcritice. Cea de-a doua ecuație descrie contracția traiectoriilor după direcția x_2 . Într-adevăr, în $\lambda = 0$, are loc o bifurcație nod-șea subcritică: cele două stări staționare, una instabilă și una stabilă, se contopesc în singura stare staționară, $(0,0)$. Aceasta are o proprietate interesantă, care este numită *semi-stabilitate*: atrage traiectoriile fazice din semiplanul $x_1 < 0$ și le respinge pe cele din semiplanul $x_1 > 0$ (fig. 4.14 b). Valorile proprii sînt

$$\begin{cases} \omega_1 = 0 \\ \omega_2 = -1 \end{cases}$$

Pentru $\lambda > 0$, sistemul (4.108) nu mai admite nici un punct fix. Deoarece $\dot{x}_1 > 0$ și $\dot{x}_2 < 0$ în întregul plan fazic, portretul fazic are forma prezentată în fig. 4.14 c.

b) Pentru $\lambda < 0$, sistemul (4.108) admite punctele fixe

$$\begin{cases} x_{01} = -\sqrt{-\lambda} \\ x_{02} = 0 \end{cases}; \begin{cases} x_{01} = 0 \\ x_{02} = 0 \end{cases} \text{ și } \begin{cases} x_{01} = \sqrt{-\lambda} \\ x_{02} = 0 \end{cases} \quad (4.112)$$

În acord cu (4.109), ecuația caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} -\lambda - 3x_{01}^2 - \omega & 0 \\ 0 & -1 - \omega \end{vmatrix} = 0$$

Valorile proprii sînt

$$\begin{cases} \omega_1 = -\lambda - 3x_{01}^2 \\ \omega_2 = -1 \end{cases} \quad (4.113)$$

Pentru stările staționare din (4.112), valorile proprii sînt, respectiv

$$\begin{cases} \omega_1 = 2\lambda \\ \omega_2 = -1 \end{cases}; \begin{cases} \omega_1 = -\lambda \\ \omega_2 = -1 \end{cases} \text{ și } \begin{cases} \omega_1 = 2\lambda \\ \omega_2 = -1 \end{cases} \quad (4.114)$$

Originea este un punct șea și celelalte două stări staționare sînt noduri stabile. Portretul fazelor este reprezentat în Fig. 4.15 a. Prima ecuație din (4.109) reprezintă forma normală a unei bifurcații furcă subcritice. Într-adevăr, în $\lambda = 0$ toate cele trei stări staționare se contopesc în origine, cu valorile proprii

$$\begin{cases} \omega_1 = 0 \\ \omega_2 = -1 \end{cases}$$

Ar rezulta că, în direcția x_1 , echilibrul este indiferent. În realitate, evoluția de-a lungul lui x_1 este descrisă de termenul neliniar din (4.109). Deoarece

$$\begin{cases} x_1 < 0 \Rightarrow \dot{x}_1 > 0 \\ x_1 > 0 \Rightarrow \dot{x}_1 < 0 \end{cases}$$

rezultă că originea este și în acest caz un nod stabil, însă contracția după x_1 se realizează din ce în ce mai lent pe măsură ce ne apropiem de origine (fig. 4.15 b).

Pentru $\lambda > 0$, originea este singurul punct fix al sistemului (4.109), iar valorile proprii sînt

$$\begin{cases} \omega_1 = -\lambda \\ \omega_2 = -1 \end{cases}$$

Rezultă că originea este, în acest domeniu al parametrului de control λ , nod stabil (fig. 4.15 c).

Aplicația 4.16

Găsiți punctele fixe și determinați stabilitatea lor pentru sistemele descrise de ecuațiile de evoluție

$$a) \dot{x} = x(\mu - x^2)(\mu - 2x^2) \quad (4.115)$$

$$b) \dot{x} = \mu - x^2 + 4x^4 \quad (4.116)$$

În fiecare caz, schițați diagrama de bifurcație și găsiți punctele de bifurcație.

Rezolvare

a) Stările staționare ale sistemului (4.115) sînt

$$x_{01} = 0; x_{02} = \sqrt{\mu}; x_{03} = -\sqrt{\mu}; x_{04} = \sqrt{\frac{\mu}{2}}; x_{05} = -\sqrt{\frac{\mu}{2}} \quad (4.117)$$

Dintre acestea, ultimele patru există doar pentru $\mu > 0$. Valoarea proprie, în acord cu (4.115), este

$$\omega = 10x_0^4 - 9\mu x_0^2 + \mu^2 \quad (4.118)$$

Pentru starea staționară $x_{01} = 0$, valoarea proprie este

$$\omega_1 = \mu^2$$

Această stare staționară este instabilă pentru orice valoare a parametrului de control μ .

Pentru stările staționare $x_{02} = \sqrt{\mu}$ și $x_{03} = -\sqrt{\mu}$, valoarea proprie este $\omega = 2\mu^2$ deci acestea sînt instabile. Pentru stările staționare $x_{04} = \sqrt{\frac{\mu}{2}}$ și $x_{05} = -\sqrt{\frac{\mu}{2}}$, valoarea proprie este $\omega = -\mu^2$, deci acestea sînt stabile. Diagrama de bifurcație este reprezentată în fig. 4.16.

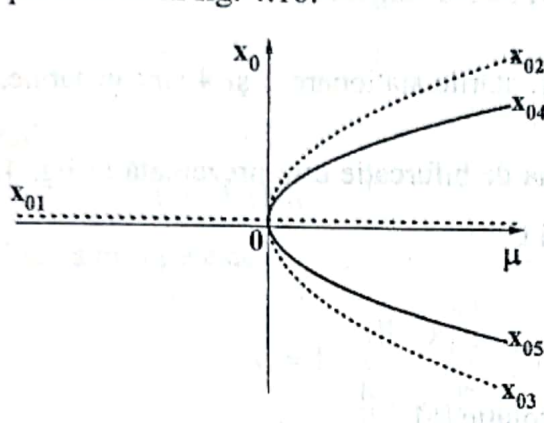


Fig. 4.16

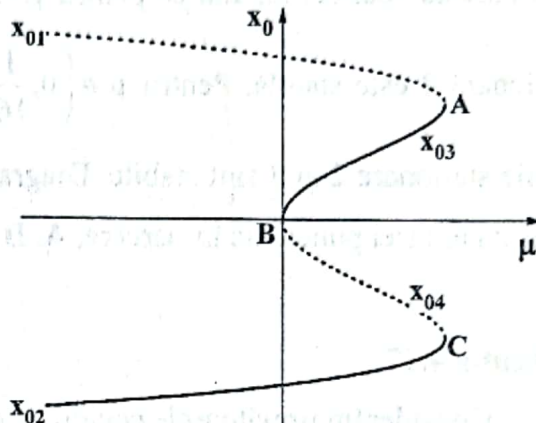


Fig. 4.17

Pentru valori negative ale parametrului de control, $x_{01} = 0$ este singura stare staționară și este instabilă. Pentru $\mu > 0$, aceasta rămîne instabilă și apar patru noi stări staționare, dintre care două stabile și două instabile.

b) Condiția de staționaritate pentru ecuația (4.116) este $\mu - x^2 + 4x^4 = 0$. Aceasta este o ecuație bipătrată, căreia i se asociază o ecuație de gradul al doilea

$$4y^2 - y + \mu = 0 \quad (4.119)$$

a) Dacă $\mu < 0$, ecuația (4.119) admite o singură rădăcină pozitivă, $\frac{1 + \sqrt{1 - 16\mu}}{8}$ și deci există două stări staționare:

$$x_{01} = \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 - 16\mu}}{8}} \text{ și } x_{02} = -\sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 - 16\mu}}{8}} \quad (4.120)$$

b) Dacă $\mu \in \left(0, \frac{1}{16}\right)$, ambele rădăcini ale ecuației (4.120) sînt pozitive și sistemul (4.116) admite patru stări staționare

$$x_{01} = \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 - 16\mu}}{8}}; x_{02} = -\sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 - 16\mu}}{8}};$$

$$x_{03} = \sqrt{\frac{1 - \sqrt{1 - 16\mu}}{8}} \text{ și } x_{04} = -\sqrt{\frac{1 - \sqrt{1 - 16\mu}}{8}} \quad (4.121)$$

Valoarea proprie asociată stărilor staționare, în conformitate cu (4.116), este

$$\omega = -2x_0 + 16x_0^3 \Rightarrow \omega = 2x_0(8x_0^2 - 1) \quad (4.122)$$

Din această ecuație, rezultă că pentru $\mu < 0$, starea staționară 1 este instabilă și starea staționară 2 este stabilă. Pentru $\mu \in \left(0, \frac{1}{16}\right)$, stările staționare 1 și 4 sînt instabile, iar stările staționare 2 și 3 sînt stabile. Diagrama de bifurcație este prezentată în fig. 4.17. Aceasta are trei puncte de întoarcere, A, B și C.

Aplicația 4.17

Considerăm următoarele ecuații de evoluție [5]

$$a) \dot{x} = x + \frac{rx}{1+x^2} \quad (4.123)$$

$$b) \dot{x} = rx - \frac{x}{1+x} \quad (4.124)$$

$$c) \dot{x} = rx - \frac{x}{1+x^2} \quad (4.125)$$

$$d) \dot{x} = rx + \frac{x^3}{1+x^2} \quad (4.126)$$

unde r este un parametru de control. Determinați stările staționare, studiați stabilitatea acestora și trasați diagrama de bifurcație funcție de r . Ce tip de bifurcații au loc? Demonstrați că, în vecinătatea punctului de bifurcație, ecuațiile de evoluție se reduc la formele normale, prezentate în paragraful 4.3.

Rezolvare

a) Ecuația de evoluție (4.123) admite stările staționare

$$x_{01} = 0 \quad (4.127)$$

care există pentru orice valoare a parametrului de control r și

$$x_{02,3} = \pm\sqrt{-r-1} \quad (4.128)$$

care există pentru $r \leq -1$.

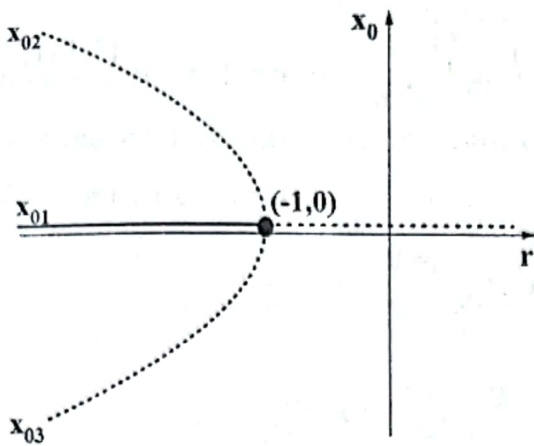


Fig. 4.18 a

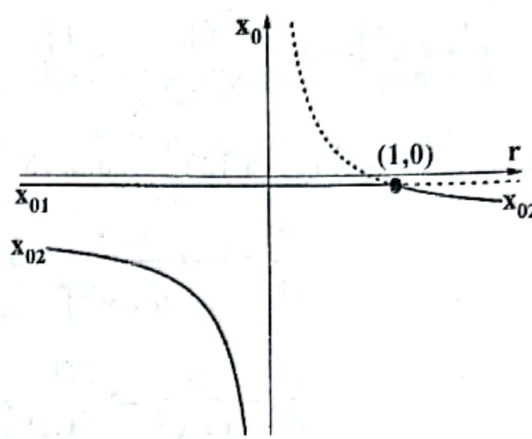


Fig. 4.18 b

Valoarea proprie este

$$\omega = 1 + \frac{r(1 - x_0^2)}{(1 + x_0^2)^2} \quad (4.129)$$

Înlocuind (4.127) în (4.129), se obține că $\omega_1 = 1 + r$. Prima stare staționară este stabilă pentru $r < -1$ și instabilă pentru $r > -1$. Înlocuind (4.128) în (4.129), se obțin valorile proprii pentru celelalte două stări staționare

$$\omega_2 = \omega_3 = \frac{2(1+r)}{r}$$

Acestea sînt pozitive pe domeniul de existență a celor două stări staționare, care vor fi instabile. În $r = -1$, are loc o bifurcație furcă subcritică (fig. 4.18 a). Verificăm acest lucru cu ajutorul formei normale. Considerăm un sistem unidimensional, a cărui evoluție este descrisă de ecuația

$$\dot{x} = f(x, r) \quad (4.130)$$

unde r este parametrul de control. Presupunem că în

$$\begin{cases} r = r_C \\ x = x^* \end{cases}$$

există un punct de bifurcație. Dezvoltăm membrul drept din ecuația de evoluție (4.130) în jurul punctului de bifurcație

$$f(x, r) = f(x^*, r_C) + (x - x^*) \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x^*, r_C} + (r - r_C) \left. \frac{\partial f}{\partial r} \right|_{x^*, r_C} + \frac{1}{2} (x - x^*)^2 \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x^*, r_C} +$$

$$+ (x - x^*) (r - r_C) \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial r} \Big|_{x^*, r_C} + \frac{1}{6} (x - x^*)^3 \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \Big|_{x^*, r_C} \quad (4.131)$$

Din ecuația de evoluție (4.123), rezultă că

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 1 + r \frac{1 - x^2}{(1 + x^2)^2} \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x^*, r_C} = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial r} = \frac{x}{1 + x^2} \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial r} \Big|_{x^*, r_C} = 0$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = -2r \frac{x(3 - x^2)}{(1 + x^2)^3} \Rightarrow \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_{x^*, r_C} = 0$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial r} = \frac{1 - x^2}{(1 + x^2)^2} \Rightarrow \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial r} \Big|_{x^*, r_C} = 1$$

$$\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} = -6r \frac{(x^4 - 6x^2 + 1)}{(1 + x^2)^4} \Rightarrow \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \Big|_{x^*, r_C} = 6$$

Înlocuind acești coeficienți în dezvoltarea (4.131), se obține

$$\dot{x} \approx (r + 1)x + x^3$$

care este, într-adevăr, forma normală a bifurcației furcă subcritice.

b) Ecuația de evoluție (4.124) admite stările staționare

$$x_{01} = 0 \quad (4.132)$$

pentru orice valoare a parametrului de control r și

$$x_{02} = \frac{1}{r} - 1 \quad (4.133)$$

care există pentru $r \neq 0$. Valorile proprii sînt

$$\omega = r - \frac{1}{(1 + x_0)^2} \quad (4.134)$$

Înlocuind (4.132) în (4.134), se obține valoarea proprie pentru prima stare staționară

$$\omega_1 = r - 1$$

Aceast punct fix este stabil pentru $r < 1$ și instabil pentru $r > 1$. Înlocuind (4.133) în (4.134), se obține

$$\omega_2 = r(1-r)$$

Starea staționară 2 este stabilă pentru $r \in (-\infty, 0) \cup (1, \infty)$ și instabilă pentru $r \in (0, 1)$.

Diagrama de bifurcație este prezentată în fig. 4.18 b. În punctul $r=1$, are loc o bifurcație transcritică. Din ecuația de evoluție (4.124), rezultă că

$$\frac{\partial f}{\partial x} = r - \frac{1}{(1+x)^2} \Rightarrow \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x^*, r_C} = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial r} = x \Rightarrow \left. \frac{\partial f}{\partial r} \right|_{x^*, r_C} = 0$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{2}{(1+x)^3} \Rightarrow \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x^*, r_C} = 2$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial r} = 1 \Rightarrow \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial r} \right|_{x^*, r_C} = 1$$

Înlocuind aceste valori în dezvoltarea (4.131), se obține că, în apropierea punctului de bifurcație

$$\dot{x} \approx (r-1)x + x^2$$

care este forma normală a bifurcației transcritice.

c) Ecuația de evoluție (4.125) admite punctele fixe

$$x_{01} = 0 \quad (4.135)$$

definită pentru orice valoare a parametrului de control r și

$$x_{02,3} = \pm \sqrt{\frac{1}{r} - 1} \quad (4.136)$$

care este definită pentru $r \in (0, 1)$. În conformitate cu (4.125), valoarea proprie este

$$\omega = r + \frac{x_0^2 - 1}{(x_0^2 + 1)^2} \quad (4.137)$$

Înlocuind (4.135) în (4.137), se obține valoarea proprie corespunzătoare primei stări staționare

$$\omega_1 = r - 1$$

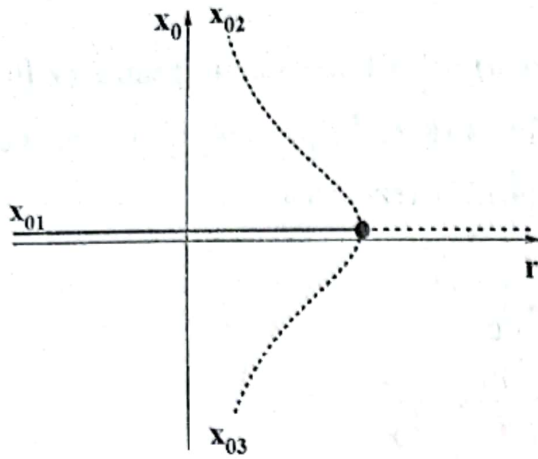


Fig. 4.18 c

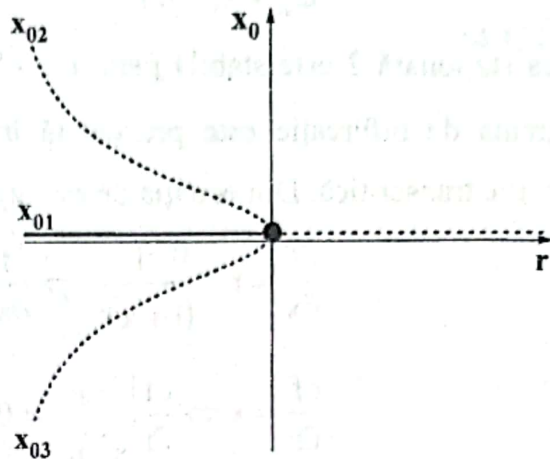


Fig. 4.18 d

Acest punct fix este stabil pentru $r < 1$ și instabil pentru $r > 1$. Pentru celelalte două stări staționare, din (4.136) și (4.137), rezultă că

$$\omega_{2,3} = 2r(1-r)$$

Aceste stări staționare sînt instabile pe domeniul de existență. Diagrama de bifurcație este prezentată în fig. 4.18 c. În $r = 1$ are loc o bifurcație furcă subcritică.

Din ecuația de evoluție (4.125), rezultă că

$$\frac{\partial f}{\partial x} = r - \frac{1-x^2}{(1+x^2)^2} \Rightarrow \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x^*, r_C} = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial r} = x \Rightarrow \left. \frac{\partial f}{\partial r} \right|_{x^*, r_C} = 0$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{2x(3-x^2)}{(1+x^2)^3} \Rightarrow \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x^*, r_C} = 0$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial r} = 1 \Rightarrow \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial r} \right|_{x^*, r_C} = 1$$

$$\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} = \frac{6(x^4 - 6x^2 + 1)}{(1+x^2)^4} \Rightarrow \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_{x^*, r_C} = 6$$

Înlocuind aceste valori în dezvoltarea (4.131), se obține

$$\dot{x} \approx (r-1)x + x^3$$

care este forma normală a unei bifurcații furcă subcritice.

d) Sistemul descris de ecuația de evoluție (4.126) admite punctele fixe

$$x_{01} = 0 \quad (4.138)$$

definit pentru orice valoare a parametrului de control r și

$$x_{02,3} = \pm \sqrt{-\frac{r}{r+1}} \quad (4.139)$$

care sînt definite pentru $r \in (-1, 0)$. Valoarea proprie asociată stărilor staționare este

$$\omega = r + \frac{x_0^2(3+x_0^2)}{(1+x_0^2)^2} \quad (4.140)$$

Înlocuind (4.138) în (4.140), se obține că

$$\omega_1 = r$$

Prima stare staționară este stabilă pentru $r < 0$ și instabilă pentru $r > 0$. Înlocuind (4.139) în (4.140), se obțin valorile proprii pentru celelalte două stări staționare

$$\omega_2 = \omega_3 = 2r(r+1) > 0$$

Accestea sînt întotdeauna instabile. Diagrama de bifurcație este prezentată în fig.

4.18 d. În $r = 0$ are loc o bifurcație furcă subcritică. Din ecuația de evoluție (4.126), rezultă că

$$\frac{\partial f}{\partial x} = r + \frac{x^2(3+x^2)}{(1+x^2)^2} \Rightarrow \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x^*, r_C} = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial r} = x \Rightarrow \left. \frac{\partial f}{\partial r} \right|_{x^*, r_C} = 0$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{2x(3-x^2)}{(1+x^2)^3} \Rightarrow \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x^*, r_C} = 0$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial r} = 1 \Rightarrow \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial r} \right|_{x^*, r_C} = 1$$

$$\frac{\partial^3 f}{\partial x^3} = \frac{6(x^4 - 6x^2 + 1)}{(1+x^2)^4} \Rightarrow \left. \frac{\partial^3 f}{\partial x^3} \right|_{x^*, r_C} = 6$$

Înlocuind acești coeficienți în dezvoltarea (4.131), se obține că, în vecinătatea punctului de bifurcație, ecuația de evoluție poate fi scrisă

$$\dot{x} \approx rx + x^3$$

care este forma normală a unei bifurcații furcă subcritice.

Aplicația 4.18

Considerăm ecuațiile de evoluție [2]

$$a) \dot{x} = (x^2 - r)(x + r) \quad (4.141)$$

$$b) \dot{x} = (x^2 + r)(r - x) \quad (4.142)$$

$$c) \dot{x} = (x - r)(2r + x) \quad (4.143)$$

Determinați punctele fixe și studiați stabilitatea acestora. Trasați diagrama de bifurcație funcție de parametrul de control r .

Rezolvare

a) Ecuația de evoluție (4.141) admite punctele fixe

$$\begin{cases} x_{01} = -r \\ x_{02} = \sqrt{r} \\ x_{03} = -\sqrt{r} \end{cases} \quad (4.144)$$

Stările staționare 2 și 3 există pentru $r > 0$. Valoarea proprie asociată stărilor staționare este

$$\omega = 3x_0^2 + 2x_0r - r \quad (4.145)$$

Înlocuind valorile la starea staționară, date de (4.145), în (4.144), se obține

$$\omega_1 = r(r - 1)$$

Starea staționară 1 este stabilă pentru $r \in (0, 1)$ și instabilă pentru $r \in (-\infty, 0) \cup (1, \infty)$.

Pentru starea staționară 2

$$\omega_2 = 2r(1 + \sqrt{r})$$

Acest punct fix este instabil pe domeniul de existență. Pentru starea staționară 3

$$\omega_3 = 2r(1 - \sqrt{r})$$

Această stare staționară este instabilă pentru $r \in (0, 1)$ și stabilă pentru $r \in (1, \infty)$.

Diagrama de bifurcație este prezentată în fig. 4.19 a. Sistemul admite două puncte de bifurcație în $r = 0$ are loc o bifurcație asemănătoare bifurcației furcă subcritice, iar în $r = 1$ are loc o bifurcație transcritică.

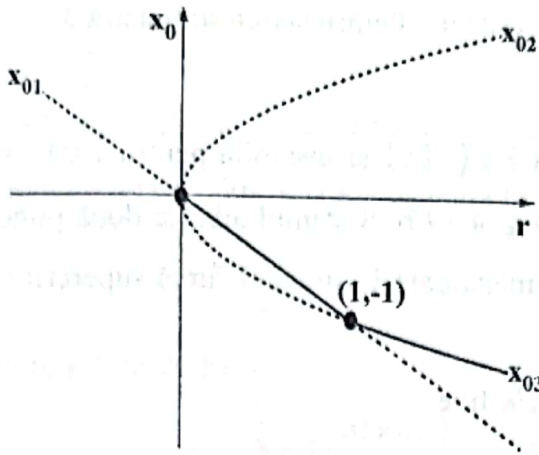


Fig. 4.19 a

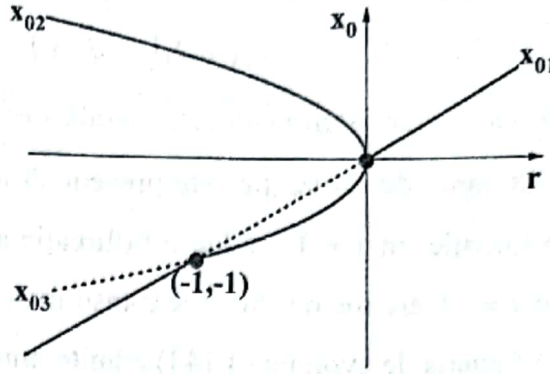


Fig. 4.19 b

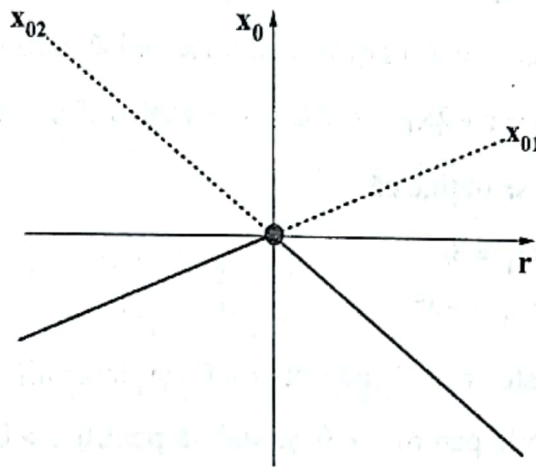


Fig. 4.19 c

b) Ecuația de evoluție (4.142) admite punctele fixe

$$\begin{cases} x_{01} = r \\ x_{02} = \sqrt{-r} \\ x_{03} = -\sqrt{-r} \end{cases} \quad (4.146)$$

Stările staționare 2 și 3 există pentru $r < 0$. Valoarea proprie asociată stărilor staționare este

$$\omega = -3x_0^2 + 2x_0r - r \quad (4.147)$$

Înlocuind valorile la starea staționară, date de (4.146), în (4.147), se obține

$$\omega_1 = -r(r+1)$$

Starea staționară 1 este instabilă pentru $r \in (-1, 0)$ și stabilă pentru $r \in (-\infty, -1) \cup (0, \infty)$. Pentru starea staționară 2

$$\omega_2 = 2r(1 + \sqrt{-r})$$

Acest punct fix este stabil pe domeniul de existență. Pentru starea staționară 3

$$\omega_3 = 2r(1 - \sqrt{-r})$$

Această stare staționară este stabilă pentru $r \in (-1, 0)$ și instabilă pentru $r \in (-\infty, -1)$. Diagrama de bifurcație este prezentată în fig. 4.19 b. Sistemul admite două puncte de bifurcație: în $r = 0$ are loc o bifurcație asemănătoare bifurcației furcă supercritice, iar în $r = -1$ are loc o bifurcație transcritică.

c) Ecuația de evoluție (4.143) admite punctele fixe

$$\begin{cases} x_{01} = r \\ x_{02} = -2r \end{cases} \quad (4.148)$$

Valoarea proprie este

$$\omega = r + 2x_0 \quad (4.149)$$

Din (4.148) și (4.149), se obține că

$$\begin{cases} \omega_1 = 3r \\ \omega_2 = -3r \end{cases}$$

Starea staționară 1 este stabilă pentru $r < 0$ și instabilă pentru $r > 0$, iar starea staționară 2 este instabilă pentru $r < 0$ și stabilă pentru $r > 0$. Diagrama de bifurcație este prezentată în fig. 4.19 c. În origine are loc o bifurcație transcritică.

4.4. Analiza de bifurcație în sisteme extinse spațial. Formularea generală

Considerăm ecuațiile neliniare de evoluție [3]

$$\frac{\partial \vec{X}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \vec{F}(\vec{X}, \{\nabla^k X_i\}, \lambda)$$

unde λ reprezintă parametrul de control. În sisteme extinse spațial, în ecuația de evoluție apare operatorul diferențial în raport cu coordonatele spațiale

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}$$

Studiem stabilitatea stării de referință $\vec{X}_S$ prin metoda micilor perturbații. Starea perturbată este

$$\vec{X} = \vec{X}_S + \vec{x}$$

unde $\vec{x}$ este perturbația. Scriem ecuația de evoluție pentru perturbații sub forma [3]

$$\frac{\partial \vec{x}(\vec{r}, t)}{\partial t} = L(\lambda, \nabla) \vec{x}(\vec{r}, t) + \vec{h}(\lambda, \nabla, \vec{x}(\vec{r}, t)) \quad (4.150)$$

unde L reprezintă operatorul liniarizat, iar $\vec{h}$ este contribuția neliniară. Presupunem că în punctul de tranziție $\lambda = \lambda_C$, ecuația liniarizată

$$\frac{\partial \vec{x}}{\partial t} = L(\lambda, \nabla) \vec{x}$$

admite soluții de forma

$$\vec{x} = \vec{u} e^{i(\text{Im } \omega_C)t} \phi_m(\vec{r}) = \vec{u} e^{i\Omega_C t} \phi_m(\vec{r})$$

unde $\phi_m(\vec{r})$ este funcție proprie a părții dependente de spațiu a lui L , asociată numărului de undă k_m și satisfăcând condiții corespunzătoare la frontieră.

Pentru λ apropiat de λ_C , dezvoltăm atât $\vec{x}$ cât și $\lambda - \lambda_C$ în serii de puteri ale parametrului mic ε

$$\begin{cases} \vec{x} = \varepsilon \vec{x}_1 + \varepsilon^2 \vec{x}_2 + \dots \\ \lambda - \lambda_C = \varepsilon \gamma_1 + \varepsilon^2 \gamma_2 + \dots \end{cases} \quad (4.151)$$

Dacă $\omega_C = 0$, atunci se introduc scalele de timp lente

$$\frac{\partial}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial \tau_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial \tau_2} + \dots \quad (4.152)$$

Dacă $\text{Re } \omega_C = 0, \text{Im } \omega_C \neq 0$, atunci

$$\frac{\partial}{\partial t} = \Omega_C \frac{\partial}{\partial T} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \tau_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial \tau_2} + \dots \quad (4.153)$$

A. Sisteme cu extindere spațială mică

Spectrul valorilor numerelor de undă k_m este discret în astfel de sisteme. Pentru λ suficient de aproape de λ_C , numai un mod sau un număr mic de moduri vor fi destabilizate. $\phi_m(\vec{r})$ va determina dependența spațială a soluției în domeniul neliniar.

B. Sisteme cu extindere spațială mare

La apariția instabilității, un continuum de moduri vor fi excitate. Datorită termenului neliniar din ecuația de evoluție (4.150), aceste moduri vor interacționa. Sistemul implică mai mult de o scală spațială. Exprimăm numărul de undă [3]

$$k_m = k_{mC} + \Delta k \quad (4.154)$$

Pulsația

$$\omega \approx a(\lambda - \lambda_C) - b(k_m - k_{mC})^2$$

Impunând condiția $\omega = 0$, rezultă

$$\Delta k \approx \left[\frac{a}{b} (\lambda - \lambda_C) \right]^{1/2} \quad (4.155)$$

Va exista o variație spațială rapidă asociată lui k_{mC} și una lentă, asociată lui Δk

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial R} + \varepsilon^{1/2} \frac{\partial}{\partial \rho_1} + \dots (\gamma_1 \neq 0) \quad (4.156)$$

sau

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial R} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \rho_1} + \dots (\gamma_1 = 0) \quad (4.157)$$

Înlocuind (4.151)-(4.157) în (4.150), obținem, corespunzător diferitelor puteri ale parametrului ε , un sistem de ecuații liniare în $\bar{x}_k$. În ordinul I, se obține

$$\bar{x}_1(\bar{r}, t) = c(\rho, \tau) \bar{u} e^{i\Omega_C T} \phi_m(\bar{R}) + cc$$

Amplitudinea c , care depinde de scalele lente de timp și de spațiu, joacă rolul unei anvelope, care modulează variația exprimată de $\phi_m(\bar{R})$.

4.4.1 Analiza de bifurcație în sisteme cu extindere spațială mare: ecuația Ginzburg-Landau complexă

Considerăm un sistem a cărui dimensiune după cel puțin o direcție este mult mai mare decât lungimea caracteristică a modului critic prezisă de analiza liniară a stabilității. Presupunem că sistemul se află în vecinătatea unei instabilități corespunzând unei perechi de valori proprii complexe, intersectînd axa imaginară în punctul de bifurcație. De asemenea, se consideră că prima instabilitate în sistem apare la $k_{mC} = 0$ (în sistem are loc ruperea simetriei temporale). Ecuația de dispersie are forma [3]

$$\text{Re } \omega \approx a(\lambda - \lambda_C) - b k_m^2 + O(k_m^4)$$

$$\text{Im } \omega \approx \Omega_C + c(\lambda - \lambda_C) + g k_m^2 + O(k_m^4)$$

Ecuția de evoluție pentru perturbație (4.150), cu dezvoltările

$$\begin{cases} \bar{x} = \varepsilon \bar{x}_1 + \varepsilon^2 \bar{x}_2 + \dots \\ \lambda - \lambda_C = \varepsilon^2 \gamma_2 + \dots \\ \frac{\partial}{\partial t} = \Omega_C \frac{\partial}{\partial T} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial \tau} + \dots \\ \frac{\partial}{\partial r} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial \rho} + \dots \end{cases} \quad (4.158)$$

se reduce la

$$\frac{\partial \bar{x}}{\partial t} = L_0(\lambda) \bar{x} + L_1(\lambda) \nabla^2 \bar{x} + \bar{h}(\bar{x}, \lambda) \quad (4.159)$$

Înlocuind (4.158) în (4.159), se obține, corespunzând coeficientului lui ε [3]

$$\left(\Omega_C \frac{\partial}{\partial T} I - L_0(\lambda_C) \right) \bar{x}_1 = 0$$

care admite soluții de forma

$$\bar{x}_1 = c(\tau, \rho) \bar{u} e^{iT} + \text{complex conjugata}$$

Introducând amplitudinea normată

$$z = \varepsilon c$$

se obține ecuația de evoluție a acesteia [3]

$$\frac{\partial z}{\partial t} = (\lambda - \lambda_C) z + (1 + i\alpha) \nabla^2 z - (1 + i\beta) |z|^2 z \quad (4.160)$$

Aceasta reprezintă forma normală a sistemului dinamic extins spațial în vecinătatea unei instabilități de tipul $(\text{Re } \omega_C = 0, \text{Im } \omega_C \neq 0, k_{mC} = 0)$. Ecuația formei normale a bifurcației Hopf este (4.42)

$$\frac{dz}{dt} = (\lambda - \lambda_C) a_1 z - a_3 |z|^2 z$$

Ecuația (4.160) aduce o corecție, introducând o anvelopă lent variabilă în spațiu, care modulează amplitudinea oscilatorilor individuali în diferite puncte ale spațiului. (4.160) se numește *ecuația Ginzburg-Landau complexă*.

Realizăm analiza liniară de stabilitate a soluției de tip ciclu limită omogen, într-un sistem unidimensional. Soluția de referință este [3]

$$z_S = (\lambda - \lambda_C)^{1/2} e^{-i\beta(\lambda - \lambda_C)t}$$

Aceasta corespunde bifurcației Hopf. Soluția perturbată este

$$z = z_S + \delta z(r, t) e^{-i\beta(\lambda - \lambda_C)t} \quad (4.161)$$

Introducând (4.161) în (4.160), în aproximația liniară rezultă

$$\frac{\partial \delta z}{\partial t} = -(1 + i\beta)(\lambda - \lambda_C)(\delta z + \delta z^*) + (1 + i\alpha)\nabla^2 \delta z$$

Separând părțile reală și imaginară, se obține ecuația caracteristică

$$\omega^2 + 2[(\lambda - \lambda_C) + k^2]\omega + [2(\lambda - \lambda_C)k^2(1 + \alpha\beta) + k^4(1 + \alpha^2)] = 0$$

În regiunea supercritică, $\lambda \geq \lambda_C$, suma rădăcinilor rămîne negativă. Singura posibilitate de instabilitate corespunde anulării termenului liber. Aceasta implică

$$1 + \alpha\beta < 0$$

Aceasta constituie o condiție de apariție a structurilor spațiotemporale. În acest domeniu, oscilațiile omogene nu mai sînt stabile. Instabilitatea este indusă de prezența în (4.160) a coeficienților complecși, sau, altfel spus, a unei variabile de fază legate de partea imaginară a amplitudinii z . Numim de aceea acest proces *instabilitate de fază*.

4.4.2. Alte exemple de ecuații ale formei normale în sisteme cu extindere spațială mare

Ecuațiile formei normale depind de tipul de instabilitate care are loc în sistem. Considerăm următoarele instabilități:

$$A. \operatorname{Re} \omega_C = 0, \operatorname{Im} \omega_C = 0, k_{mC} \neq 0.$$

Situația se numește instabilitate cu ruperea simetriei spațiale și include, drept cazuri particulare, instabilitățile Bénard și Turing. Considerăm ecuația de evoluție pentru perturbații (4.159). Se utilizează dezvoltările [3]

$$\begin{cases} \bar{x} = \varepsilon \bar{x}_1 + \varepsilon^2 \bar{x}_2 + \dots \\ \lambda - \lambda_C = \varepsilon^2 \gamma_2 + \dots \\ \frac{\partial}{\partial t} = \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial \tau} + \dots \\ \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial R} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \rho} + \dots \end{cases} \quad (4.162)$$

Înlocuind (4.162) în (4.159) și identificînd coeficienții diferitelor puteri ale lui ε , pentru puterea I a lui ε se găsește că

$$\left[L_0(\lambda_C) + L_1(\lambda_C) \frac{\partial^2}{\partial R^2} \right] \tilde{x}_1 = 0$$

Aceasta admite soluții de forma

$$\tilde{x}_1 = c(\tau, \rho) \tilde{u} e^{ik_C \tilde{R}} + \text{complex conjugata}$$

Pentru amplitudinea normată $z = \varepsilon c$, se obține [3]

$$\frac{\partial z}{\partial t} = (\lambda - \lambda_C) a_1 z + D \frac{\partial^2 z}{\partial r^2} - a_3 |z|^2 z \quad (4.163)$$

Spre deosebire de ecuația Ginzburg-Landau complexă, în ecuația (4.163), coeficienții a_1 , D și a_3 sînt reali.

B. Bifurcații secundare. Instabilitatea Eckhaus

Considerăm ecuația (4.163) cu $a_1 = D = a_3$

$$\frac{\partial z}{\partial t} = (\lambda - \lambda_C) z + \frac{\partial^2 z}{\partial r^2} - |z|^2 z$$

Ecuația aceasta admite o familie de soluții independente de timp, de forma [3]

$$z_S = (\lambda - \lambda_C - \Delta k^2)^{1/2} e^{i(\Delta k r + \phi)}$$

unde Δk este un număr de undă mic, descriind modularea structurii de bază la numărul de undă critic k_C și ϕ este o fază arbitrară. Studiem stabilitatea acestor soluții.

Luăm

$$z = (\lambda - \lambda_C - \Delta k^2)^{1/2} [1 + \delta z(r, t)] e^{i(\Delta k r + \phi)}$$

Ecuația liniarizată pentru δz are forma

$$\frac{\partial \delta z}{\partial t} = -(\lambda - \lambda_C - \Delta k^2) (\delta z + \delta z^*) + 2i\Delta k \frac{\partial \delta z}{\partial r} + \frac{\partial^2 \delta z}{\partial r^2} \quad (4.164)$$

Descompunem δz în partea reală și cea imaginară

$$\delta z = u + iv$$

cu care (4.164) devine

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = -2(\lambda - \lambda_C - \Delta k^2)u - 2\Delta k \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} \\ \frac{\partial v}{\partial t} = 2\Delta k \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 v}{\partial r^2} \end{cases} \quad (4.165)$$

Căutăm soluții ale acestor ecuații sub forma

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} e^{ikr} e^{i\omega t} \quad (4.166)$$

Înlocuind (4.166) în (4.165), se obține ecuația caracteristică

$$\omega^2 + 2[(\lambda - \lambda_C - \Delta k^2) + \kappa^2]\omega + [2(\lambda - \lambda_C - \Delta k^2) + \kappa^2]\kappa^2 - 4\kappa^2\Delta k^2 = 0$$

Presupunând κ mic, neglijăm termenii pătratici în κ . Termenul constant devine

$$2\kappa^2(\lambda - \lambda_C - 3\Delta k^2) + O(\kappa^4)$$

O instabilitate cu schimbarea semnului lui ω se dezvoltă pentru numere de undă Δk cu

$$|\Delta k| > \left(\frac{\lambda - \lambda_C}{3} \right)^{1/2}$$

Structurile periodice cu o modulare cu lungime de undă suficient de depărtată de structura de bază ($\Delta k = 0$) sînt instabile în raport cu modurile cu lungime de undă mare. În aceste condiții, apare un proces numit instabilitate Eckhaus.

5. Aplicații discrete

5.1. Recurențe unidimensionale. Aspecte generale.

Prezentăm pentru început două tipuri de probleme de natură fizică care sînt descrise de recurențe unidimensionale, și anume secțiunile Poincaré și cinetica sistemelor biologice.

A. Secțiunea Poincaré

Notăm cu γ traiectoria fizică a unui sistem dinamic cu timp continuu și cu S o suprafață care intersectează transversal această traiectorie (fig. 5.1). Intersecția lui γ cu S generează o succesiune de puncte $P_0, P_1, P_2, \dots$. Impunem condiția ca panta în punctele de intersecție să aibă un anumit semn. În planul de secțiune, poziția fiecărui punct poate fi caracterizată cu ajutorul a două coordonate, $P_i(x_i, y_i)$. În consecință, dinamica inițială induce pe S o dinamică de forma

$$\bar{x}_{n+1} = \bar{g}(\bar{x}_n) \quad (5.1)$$

Această dinamică nu mai este continuă în timp, ci este o recurență. $\bar{g}$ se numește aplicația Poincaré, S fiind planul de secțiune Poincaré. Introducînd un sistem corespunzător de coordonate pe S , putem scrie (5.1) ca [3]

$$\begin{cases} x_{n+1} = f(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = g(x_n, y_n) \end{cases} \quad (5.2)$$

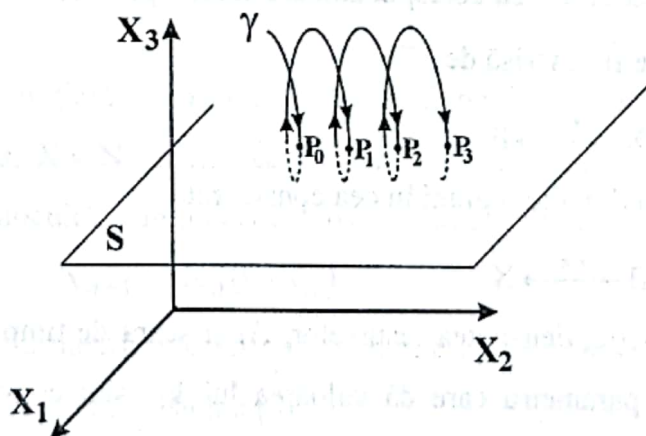


Fig. 5.1

Observații:

- Pornind de la sistemul tridimensional inițial, am ajuns la o recurență bidimensională,

deci mulțimea studiată (ansamblul punctelor de secțiune) are dimensiunea mai mică cu unu față de mulțimea inițială (traectoria fizică γ).

- Recurențele de tipul (5.1) sau (5.2) conduc la simulări numerice mult mai precise decât în cazul sistemelor dinamice cu timp continuu.

- Determinînd obiectul care atrage P_n pentru intervale mari de timp, vom deduce o serie de proprietăți ale atractorului sistemului dinamic inițial. Pentru o soluție de tip ciclu limită

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n \\ y_{n+1} = y_n \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x^* = f(x^*, y^*) \\ y^* = g(x^*, y^*) \end{cases} \quad (5.3)$$

deci o soluție periodică corespunde unui punct fix al aplicației Poincaré.

B. Cinetica sistemelor biologice

Am văzut în capitolul 1 că dezvoltarea unei colonii de bacterii poate fi descrisă realist, în cel mai simplu mod, cu ajutorul unei ecuații diferențiale ordinare, numite ecuația logistică. Acest tip de ecuație este valabil și în cazul sistemelor ecologice simple [3]. Notăm cu X densitatea populației, adică numărul de indivizi de pe unitatea de suprafață, iar cu A densitatea resurselor. Procesele care contribuie la variația lui X sînt [3]:

a) nașterea, care poate fi descrisă formal cu ajutorul transformării



unde k_1 este constanta de viteză corespunzătoare acestui proces.

b) moartea, care poate fi descrisă de



c) migrarea populației din alte regiuni în cea considerată



Într-o primă aproximație, densitatea resurselor, A , și scara de timp după care are loc creșterea populației, parametru care dă valoarea lui k_1 , sînt constante. În realitate, resursele sînt limitate. Ca urmare a creșterii densității populației, are loc micșorarea ratei de creștere k_1 , proces numit reglare. Cel mai simplu mod de a modela acest fenomen este cu ajutorul relației

$$k_1(X) = a - bX \quad (5.7)$$

Ținând cont de ecuațiile (5.4), (5.5) și (5.7) (migrarea este neglijată), rezultă ecuația de evoluție a densității de populație

$$\frac{dX}{dt} = (a - bX)AX - k_2X \quad (5.8)$$

Făcând notațiile

$$\begin{cases} k = aA - k_2 \\ N = \frac{aA - k_2}{bA} \end{cases} \quad (5.9)$$

se obține *ecuația logistică*

$$\frac{dX}{dt} = kX \left(1 - \frac{X}{N} \right) \quad (5.10)$$

Soluția acesteia este prezentată în fig. 5.2

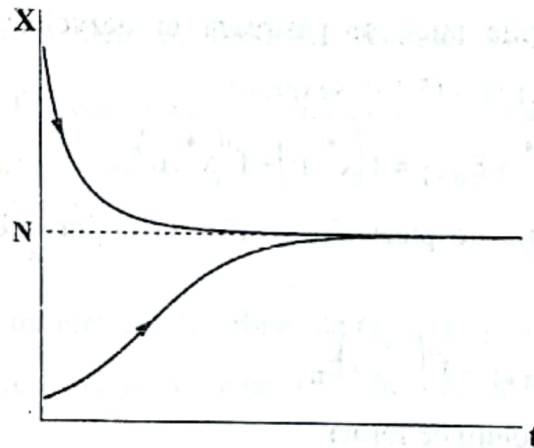


Fig. 5.2

După o variație inițială exponențială, sistemul realizează o tranziție rapidă spre o valoare de platou, $X = N$, numită capacitatea ecosistemului. Ecuația cu timp continuu (5.10) poate fi înlocuită, prin procedeul discutat în capitolul întâi, de ecuația discretă

$$x_{n+1} = \mu x_n (1 - x_n) \quad (5.11)$$

În cele ce urmează, vom deduce anumite proprietăți generale ale recurențelor, plecând de la cazul unidimensional [3]

$$x_{n+1} = f(x_n, \mu) \quad (5.12)$$

unde μ reprezintă un parametru de control. Pornind de la condiția inițială x_0 , aplicarea repetată a lui f generează o secvență de puncte $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$, numită *orbită*. În cazul

aplicațiilor discrete, indicele n joacă rolul pe care îl are timpul în cazul sistemelor continue. Notăm cu x^* un punct fix al aplicației (5.12)

$$x^* = f(x^*, \mu) \quad (5.13)$$

Ca și în cazul sistemelor continue, punctele fixe corespund stărilor staționare ale sistemului considerat și stabilitatea acestora poate fi studiată prin metoda micilor perturbații. Considerăm o stare perturbată

$$x_n = x^* + \xi_n \quad (5.14)$$

unde ξ_n reprezintă perturbația. Înlocuind (5.14) în (5.12), obținem

$$x^* + \xi_{n+1} = f(x^* + \xi_n, \mu) \quad (5.15)$$

Dezvoltăm f în serie Taylor în jurul punctului fix

$$f(x^* + \xi_n, \mu) = f(x^*, \mu) + f'(x^*, \mu)\xi_n + \dots \quad (5.16)$$

Presupunând perturbațiile mici, se păstrează în dezvoltarea în serie Taylor doar termenul liniar. Din (5.15) și (5.16), se obține

$$x^* + \xi_{n+1} \approx f(x^*, \mu) + f'(x^*, \mu)\xi_n$$

Ținând cont de condiția de punct fix (5.13), se obține relația de recurență pentru perturbație

$$\xi_{n+1} = f'(x^*, \mu)\xi_n \quad (5.17)$$

Ecuția (5.17) admite soluții de forma

$$\xi_n = C\rho^n \quad (5.18)$$

unde C este o constantă care depinde de valoarea inițială a perturbației. Substituția lui (5.18) în (5.17) dă

$$\rho = f'(x^*, \mu) \quad (5.19)$$

Din (5.18) vedem că ξ_n descrește în timp numai dacă $|\rho| < 1$. Astfel, ajungem la condiția de stabilitate asimptotică a punctului fix x^*

$$|f'(x^*, \mu)| < 1 \quad (5.20)$$

Cazul $|f'(x^*, \mu)| = 1$ corespunde stabilității neutre (marginale).

Se numește un k -ciclu (sau orbită de perioadă k) al aplicației unidimensionale (5.12) ansamblul punctelor

$$x_0, x_1, \dots, x_{k-1}, x_k \text{ unde } x_k = x_0 \text{ și } x_n = f(x_{n-1}, \mu), \quad n = \overline{1, k} \quad (5.21)$$

cu proprietatea că toate cele k valori sînt distincte. După k iterații, sistemul revine la condiția inițială. Fiecare element al ciclului de perioadă k este punct fix al aplicației

$$\underbrace{f \circ f \circ \dots \circ f}_{k \text{ ori}}$$

deoarece sînt satisfăcute relațiile

$$x_1 = f(x_0, \mu)$$

$$x_2 = f(x_1, \mu) = f(f(x_0, \mu)) = f^2(x_0, \mu) \quad (5.22)$$

$\vdots$

$$x_k = f^k(x_0, \mu) = x_0$$

Studiem stabilitatea acestui ciclu de ordin k . Deoarece elementele k -ciclului sînt puncte fixe ale aplicației f^k , condiția de stabilitate este similară condiției (5.20)

$$\left| \frac{df^k}{dx} \right|_{x^*} < 1 \quad (5.23)$$

unde x^* este oricare dintre elementele orbitei de ordin k . Ținînd cont de proprietățile de derivare a funcțiilor compuse, condiția de stabilitate devine

$$\prod_{i=0}^{k-1} |f'(x_i, \mu)| < 1 \quad (5.24)$$

În acord cu (5.24), panta aplicației f^k este identică pentru toți cei k membri ai orbitei de ordin k . Rezultă că, prin creșterea parametrului de control μ peste valoarea critică, toate cele k puncte ale orbitei se destabilizează simultan.

Aplicația 5.1

Considerăm aplicațiile unidimensionale [5]

$$\text{a) } x_{n+1} = x_n^2 \quad (5.25)$$

$$\text{b) } x_{n+1} = \frac{2x_n}{1+x_n} \quad (5.26)$$

$$c) x_{n+1} = 3x_n - x_n^3 \quad (5.27)$$

$$d) x_{n+1} = x_n^2 + c \quad (5.28)$$

Determinați punctele fixe ale acestora și studiați stabilitatea lor.

Rezolvare

a) Condiția de punct fix pentru aplicația (5.25) este

$$x^* = (x^*)^2$$

care are soluțiile

$$x_1^* = 0; x_2^* = 1 \quad (5.29)$$

Verificăm dacă este satisfăcută condiția de stabilitate (5.20). Aplicația (5.25) poate fi scrisă

$$x_{n+1} = f(x_n) \Rightarrow f'(x) = 2x \quad (5.30)$$

Înlocuind valorile punctelor fixe, (5.29), în (5.30), se obține

$$|f'(x)|_{x_1^*} = 0; |f'(x)|_{x_2^*} = 2$$

Primul punct fix este stabil, iar al doilea este instabil.

b) Condiția de punct fix pentru aplicația (5.26) este

$$x^* = \frac{2x^*}{1+x^*}$$

Aceasta are soluțiile

$$x_1^* = 0; x_2^* = 1 \quad (5.31)$$

Deoarece

$$f'(x) = \frac{2}{(1+x)^2}$$

Panta tangentei în punctele fixe este

$$f'(x)|_{x_1^*} = 2; f'(x)|_{x_2^*} = 1/2$$

Primul punct fix este instabil, iar al doilea este stabil.

c) Ecuația de punct fix pentru aplicația (5.27) este

$$(x^*)^3 - 2x^* = 0$$

Accasta are rădăcinile

$$x_1^* = 0; x_2^* = \sqrt{2}; x_3^* = -\sqrt{2}$$

Derivata în punctul fix este

$$f'(x^*) = 3 - 3(x^*)^2$$

Din aceasta, se obține că

$$f'(x) \Big|_{x_1^*} = 3; f'(x) \Big|_{x_2^*} = f'(x) \Big|_{x_3^*} = -3$$

Toate punctele fixe sînt instabile.

d) Condiția de punct fix pentru aplicația (5.28) este

$$x^* = (x^*)^2 + c$$

Aplicația (5.28) are punctele fixe

$$x_{1,2}^* = \frac{1 \pm \sqrt{1-4c}}{2}$$

pentru valori ale parametrului de control ce satisfac condiția $c < 1/4$. Derivata în punctele fixe este

$$|f'(x) \Big|_{x_1^*} = 1 + \sqrt{1-4c}; \text{ primul punct fix este întotdeauna instabil.}$$

$$|f'(x) \Big|_{x_2^*} = 1 - \sqrt{1-4c}; \text{ al doilea punct fix este întotdeauna stabil.}$$

Aplicația 5.2

Considerăm aplicația unidimensională [12]

$$x_{n+1} = bx_n \left(\frac{1+b}{b} - x_n \right) \quad (5.32)$$

unde b este un parametru de control. Determinați punctele fixe și studiați stabilitatea acestora.

Rezolvare

Condiția de punct fix pentru aplicația (5.32) este

$$x^* = (1+b)x^* - bx^{*2}$$

Soluțiile acesteia sînt

$$x_1^* = 0; x_2^* = 1 \quad (5.33)$$

și există pentru orice valoare a parametrului de control b . Derivata în punctul fix este

$$f'(x) = 1 + b - 2bx^*$$

Pentru primul punct fix,

$$f'(x) \Big|_{x_1^*} = 1 + b$$

În acord cu (5.20), punctul fix $x_1^* = 0$ este asimptotic stabil dacă $b \in (-2, 0)$. Pentru cel de-al doilea punct fix

$$f'(x) \Big|_{x_2^*} = 1 - b$$

Condiția de stabilitate asimptotică, (5.20), este satisfăcută dacă $b \in (0, 2)$. Prin urmare, în funcție de valorile parametrului de control b , sînt posibile situațiile:

$b < -2$, ambele puncte fixe sînt instabile;

$b \in (-2, 0)$, $x_1^* = 0$ este stabil și $x_2^* = 1$ este instabil;

$b \in (0, 2)$, $x_1^* = 0$ este instabil și $x_2^* = 1$ este stabil;

$b > 2$, ambele puncte fixe sînt instabile.

5.2. Aplicația logistică. Scenariul Feigenbaum de tranziție spre haos.

Fie aplicația unidimensională numită *aplicația logistică*

$$x_{n+1} = 4\mu x_n(1 - x_n) \quad \text{cu} \quad \begin{cases} 0 \leq \mu \leq 1 \\ 0 \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (5.34)$$

unde μ reprezintă un parametru. Ecuația de punct fix corespunzătoare acesteia este

$$x = 4\mu x(1 - x)$$

Aceasta posedă două soluții:

$x_1^* = 0$, care există pentru toate valorile parametrului μ ;

$x_2^* = 1 - \frac{1}{4\mu}$ care există dacă $\mu > \frac{1}{4}$.

Studiem stabilitatea acestor puncte fixe, pe baza condiției (5.20)

$$f(x) = 4\mu x(1 - x) \Rightarrow f'(x) = 4\mu - 8\mu x$$

Condiția de stabilitate a punctului fix, (5.20), devine

$$|4\mu - 8\mu x| < 1 \quad (5.35)$$

Din punct de vedere al numărului de puncte fixe și a stabilității acestora, sînt posibile situațiile:

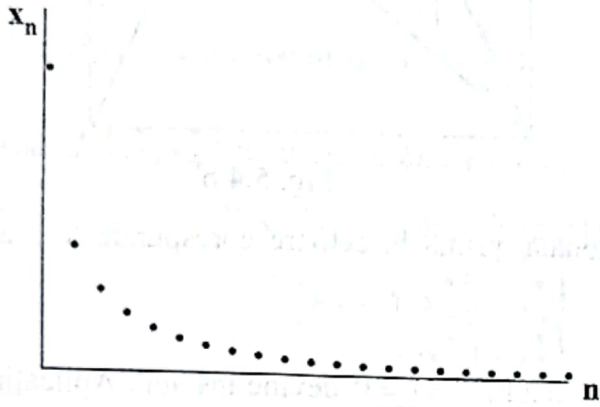


Fig. 5.3 a

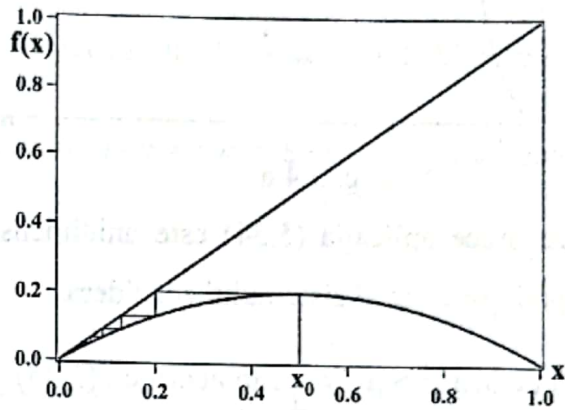


Fig. 5.3 b

a) Dacă $\mu < \frac{1}{4}$, aplicația are un singur punct fix, $x_1^* = 0$. Conform (5.35), acesta este

stabil cît timp $\mu < \frac{1}{4}$, deci atît timp cît este singurul punct fix al sistemului. Orice

condiție inițială din intervalul $(0,1)$ converge la acest punct fix. Spunem că intervalul

$(0,1)$ constituie *bazinul de atracție* al punctului fix $x_1^* = 0$. Această situație corespunde

staționarității din cazul sistemelor cu timp continuu. Fig. 5.3 a prezintă x_n ca funcție

de n , pentru $\mu = 0.2$ și $x_0 = 0.5$; se observă convergența lui x_n către punctul fix. O

reprezentare frecvent utilizată în cazul aplicațiilor discrete este cea din fig. 5.3 b. Într-

un pătrat de latură unitate, se trasează prima bisectoare, corespunzătoare condiției

$y = x$, și graficul funcției $f(x) = 4\mu x(1-x)$. Elementele succesive ale iterației (5.34)

se obțin astfel: verticala ridicată din condiția inițială x_0 intersectează graficul funcției

f în punctul (x_0, x_1) . Orizontala dusă din acest punct intersectează prima bisectoare în

(x_1, x_1) . Verticala dusă de aici, intersectează graficul lui f în (x_2, x_1) . Realizăm

iterativ acest procedeu, cu observația că punctele obținute astfel pe graficul lui f sînt

tocmai elementele iterației (5.34),

$$(x_n, x_{n+1}) \quad n = 0, 1, \dots$$

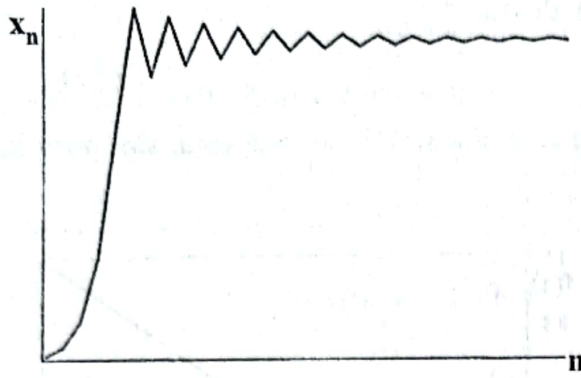


Fig. 5.4 a

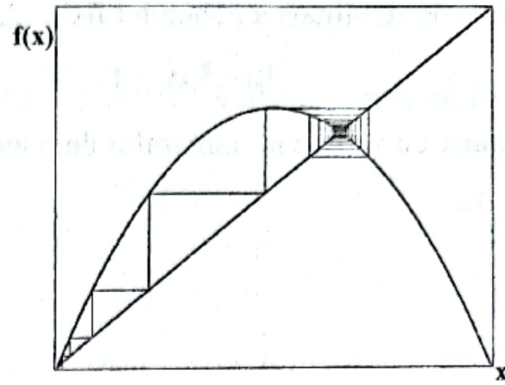


Fig. 5.4 b

Deoarece aplicația (5.34) este unidimensională, prima bisectoare corespunde tocmai spațiului fazic al sistemului considerat.

b) Pentru $\mu > \mu_0 = \frac{1}{4}$, în acord cu (5.35), punctul fix $x_1^* = 0$ devine instabil. Aplicația va prezenta și un al doilea punct fix, $x_2^* = 1 - 1/4\mu$. Acesta va fi stabil, conform (5.35), atât timp cât parametrul de control μ îndeplinește condiția

$$\frac{1}{4} < \mu < \frac{3}{4}$$

Sistemul prezintă un comportament periodic, numit *de perioadă unu*. Orice condiție inițială $x_0 \in [0, 1]$ va converge către atractorul x_2^* . Intervalul $(0, 1)$ este bazinul de atracție al atractorului x_2^* . Evoluția prezentată în fig. 5.4 a și b corespunde unei valori a parametrului de control $\mu = 0.72$ și unei condiții inițiale $x_0 = 0.01$.

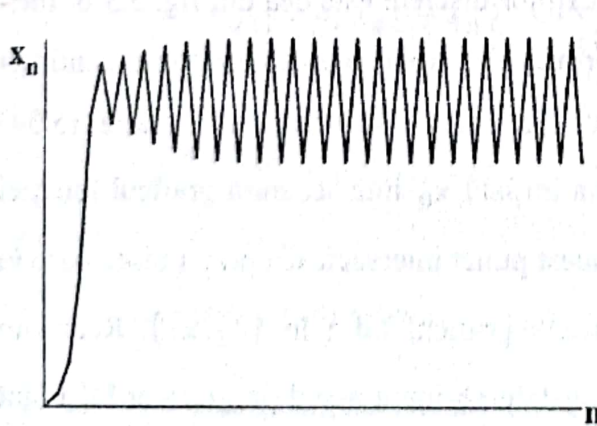


Fig. 5.5 a

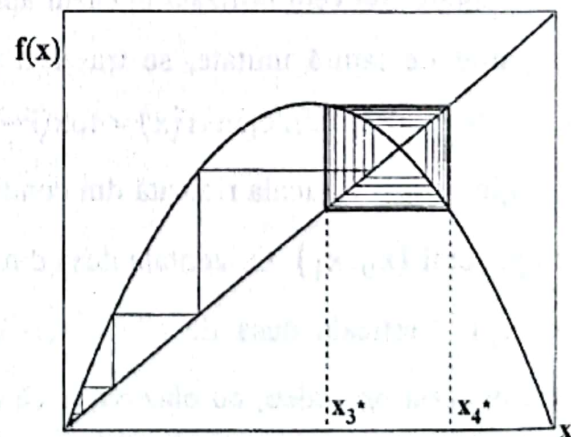


Fig. 5.5 b

c) În acord cu (5.35), dacă $\mu > \mu_1 = \frac{3}{4}$, punctul fix x_2^* devine instabil. Apare o nouă soluție, de forma unui ciclu de ordinul al doilea (fig. 5.5 a,b)

$$x_3^* \xrightarrow{f} x_4^* \xrightarrow{f} x_3^*$$

Tranziția care are loc în $\mu = \mu_1 = \frac{3}{4}$ de la un punct fix stabil x_2^* la o orbită biperiodică stabilă (x_3^*, x_4^*) se numește *bifurcație cu dublare de perioadă*. Soluția (x_3^*, x_4^*) poate fi construită analitic, folosind ecuația (5.34)

$$\begin{cases} x_3^* = 4\mu x_4^* (1 - x_4^*) \\ x_4^* = 4\mu x_3^* (1 - x_3^*) \end{cases} \quad (5.36)$$

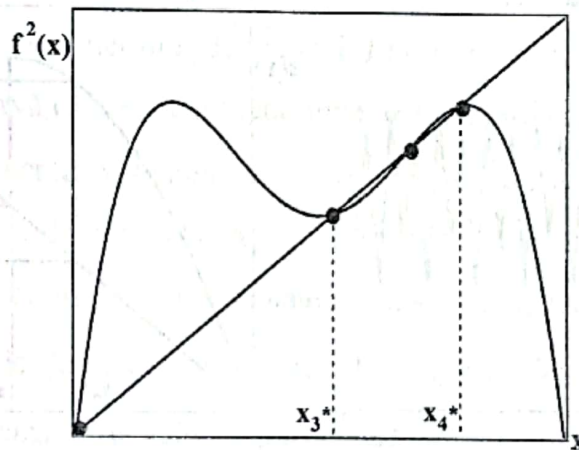


Fig. 5.5 c

Rezolvând acest sistem de ecuații algebrice, se obține

$$x_3^* = \frac{1}{8\mu} \left[1 + 4\mu - (16\mu^2 - 8\mu - 3)^{1/2} \right]; \quad x_4^* = \frac{1}{8\mu} \left[1 + 4\mu + (16\mu^2 - 8\mu - 3)^{1/2} \right] \quad (5.37)$$

La nivelul lui f , valorile $x_{3,4}^*$ sînt părți ale unei singure soluții, și sînt vizitate succesiv în decursul timpului. La nivelul lui $f(f(x))$, fiecare dintre acestea corespunde unui punct fix distinct (fig. 5.5 c), deoarece:

$$x_4^* = f(x_3^*) \Rightarrow x_3^* = f(x_4^*) = f^2(x_3^*)$$

x_3^* și x_4^* sînt puncte fixe stabile ale lui f^2 , atît timp cît

$$\left| \frac{df^2}{dx} \right|_{x_3^*} = \left| \frac{df^2}{dx} \right|_{x_4^*} = |f'(x_3^*, \mu)| |f'(x_4^*, \mu)| < 1 \quad (5.38)$$

Deoarece $f'(x) = 4\mu - 8\mu x$, înlocuind (5.37) în (5.38), se obține condiția de stabilitate a ciclului de perioadă doi

$$|-16\mu^2 + 8\mu + 4| < 1$$

Aceasta este satisfăcută pentru valori ale parametrului de control $\mu \in \left(\frac{3}{4}, \frac{1+\sqrt{6}}{4} \right)$.

În afară de x_3^* și x_4^* , aplicația f^2 mai admite ca puncte fixe și punctele fixe ale lui f , x_1^* și x_2^* , care sînt instabile.

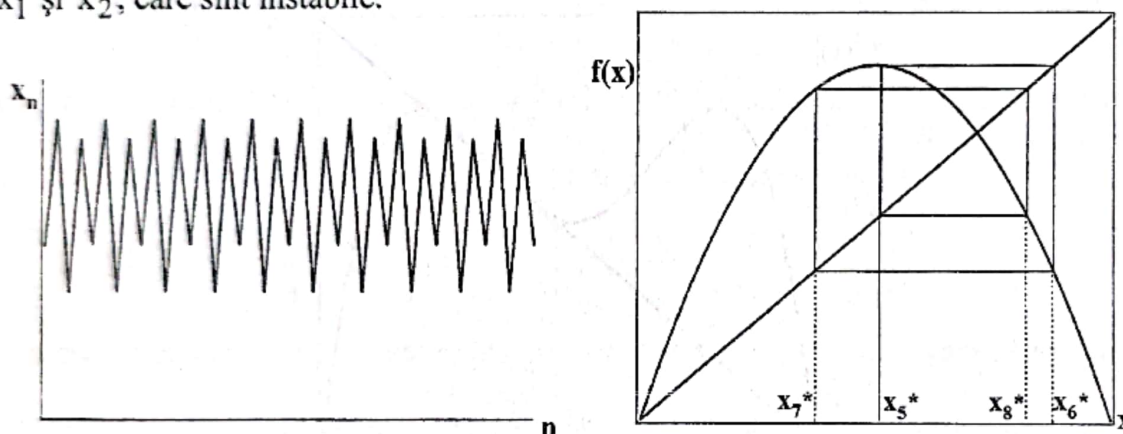


Fig. 5.6 a

Fig. 5.6 b

d) Pentru $\mu > \mu_2 = \frac{1+\sqrt{6}}{4}$, orbita biperiodică devine instabilă, cu apariția unei orbite de perioadă patru, $(x_5^*, x_6^*, x_7^*, x_8^*)$, stabile (fig. 5.6 a,b). Acestea sînt puncte fixe ale aplicației $f^4(x)$ (fig. 5.6 c). Pe lângă $(x_5^*, x_6^*, x_7^*, x_8^*)$, aplicația f^4 mai admite ca puncte fixe punctele fixe ale lui f , x_1^* și x_2^* , și punctele fixe ale lui f^2 , x_3^* și x_4^* . Aceste ultime patru puncte fixe sînt instabile.

Procesul dublărilor de perioadă continuă la creșterea lui μ , producînd succesiv o 'cascadă a dublărilor de perioadă',

$$1 \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 8 \rightarrow \dots \rightarrow 2^k \rightarrow \dots$$

Reprezentînd punctele fixe stabile ca funcție de parametrul de control μ , se

obține diagrama de bifurcație din fig. 5.7.

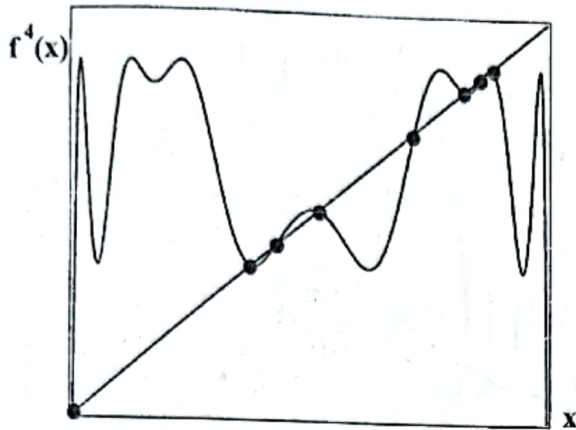


Fig. 5.6 c

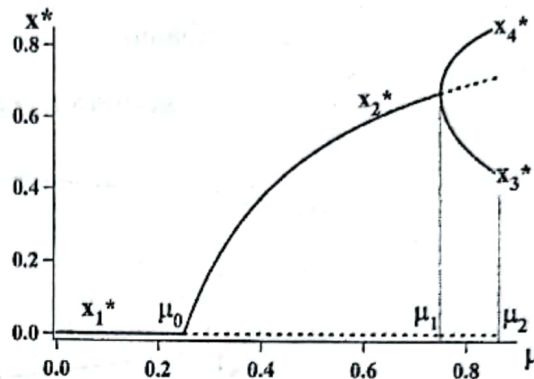


Fig. 5.7

Diagrama de bifurcație din fig. 5.7 prezintă comportarea sistemului pentru un domeniu mai larg de valori ale parametrului de control. Liniile întrerupte corespund punctelor fixe instabile. Se observă că are loc o succesiune de bifurcații cu dublare de perioadă.

Crescînd suplimentar valoarea parametrului de control μ , continuă succesiunea de bifurcații cu dublare de perioadă. Așa cum se observă și din fig. 5.7, punctele de bifurcație μ_i sînt din ce în ce mai apropiate, o dată cu creșterea lui i . Tranziția de la comportament periodic la haos culminează la $\mu_\infty < 1$. Valorile parametrului de bifurcație se acumulează la o valoare particulară μ_∞ , pentru care sistemul devine haotic (fig. 5.8a și b). Evoluția sistemului devine puternic neregulată, impredictibilă, toate orbitele periodice fiind instabile.

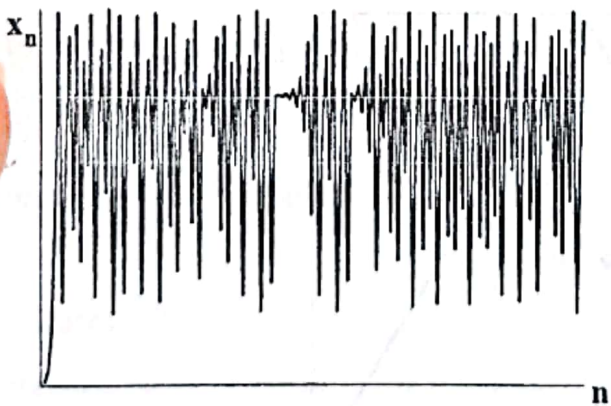


Fig. 5.8 a

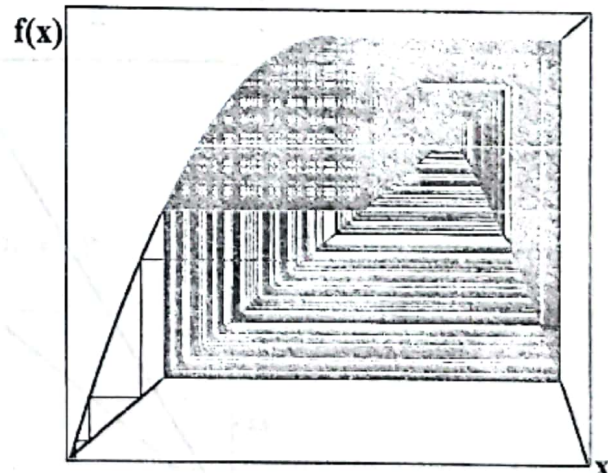


Fig. 5.8 b

Pentru aplicații pătratice, viteza de convergență a valorilor de bifurcație este o constantă, independentă de forma exactă a aplicației,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mu_n - \mu_{n-1}}{\mu_{n+1} - \mu_n} = 4,669201... \quad (5.39)$$

numită constanta lui Feigenbaum.

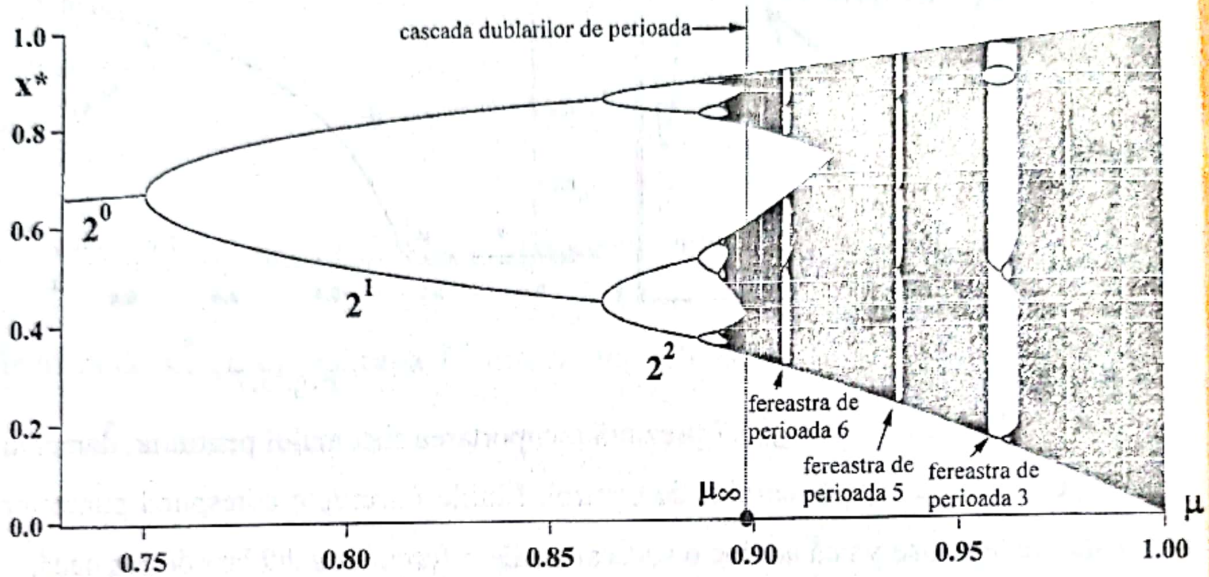


Fig. 5.9

Domeniul $\mu_\infty < \mu < 1$ corespunde unei dinamici haotice. În acest domeniu apar ferestre corespunzătoare unor cicluri de perioadă p ($p = 3, 5, 6, \dots$) care bifurcă, la rîndul lor, cu creșterea lui μ (fig. 5.9).

Ecuatia logistică cu $\mu = 1$ generează o altă aplicație unidimensională, numită aplicația cortului. Fie transformarea

$$x_n = \sin^2 \frac{\pi y_n}{2} \quad (5.40)$$

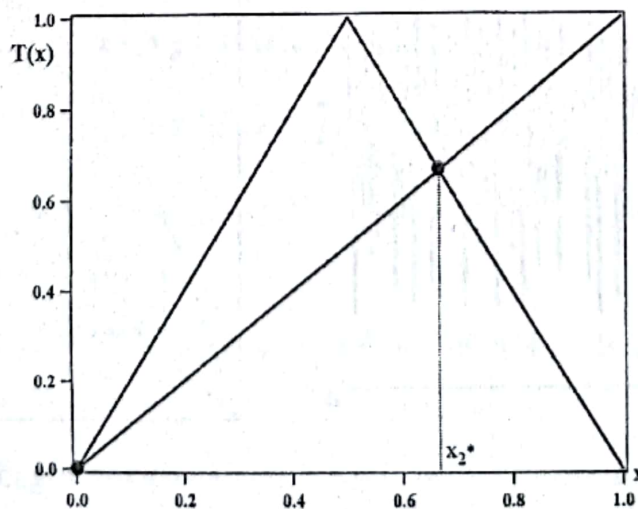


Fig. 5.10

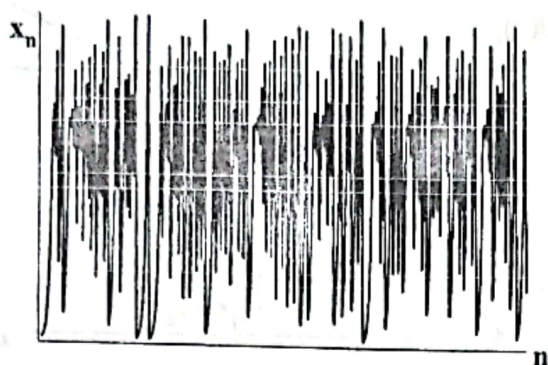


Fig. 5.11 a

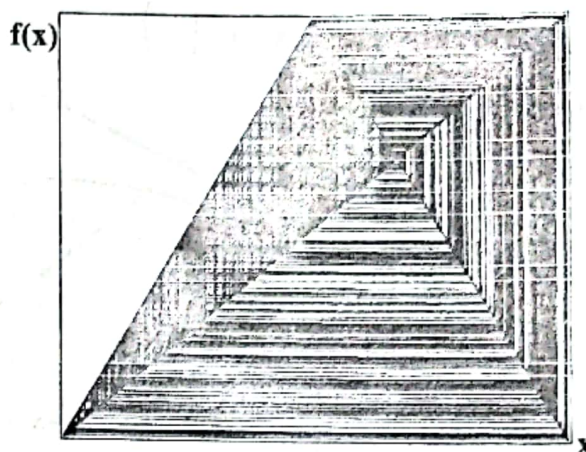


Fig. 5.11 b

Înlocuind (5.40) în (5.34) pentru $\mu = 1$, se obține

$$y_{n+1} = \begin{cases} 2y_n, & 0 \leq y_n \leq \frac{1}{2} \\ 2 - 2y_n, & \frac{1}{2} \leq y_n \leq 1 \end{cases} \quad (5.41)$$

Denumirea de aplicația cortului este legată de forma graficului acesteia (fig. 5.10).

Deoarece valoarea absolută a pantei este peste tot mai mare decât 1, rezultă că cele două puncte fixe, $y_1^* = 0$ și $y_2^* = 2/3$ sînt instabile. Aplicația discretă (5.41) prezintă o dinamică haotică (fig. 5.11).

Aplicația 5.3

Considerăm aplicațiile unidimensionale [6]

$$a) \quad x_{n+1} = x_n + \mu - x_n^2 \quad (5.42)$$

$$b) \quad x_{n+1} = x_n + \mu x_n - x_n^2 \quad (5.43)$$

$$c) \quad x_{n+1} = x_n + \mu x_n + \alpha x_n^3 \quad (5.44)$$

unde μ este un parametru de control. Determinați punctele fixe ale acestor aplicații și studiați stabilitatea acestora. Trasați diagrama de bifurcație. Ce bifurcații au loc în fiecare caz?

Rezolvare

a) Scriem recurența (5.42) sub forma

$$x_{n+1} = f(x_n)$$

Condiția de punct fix pentru aplicația (5.42) poate fi scrisă

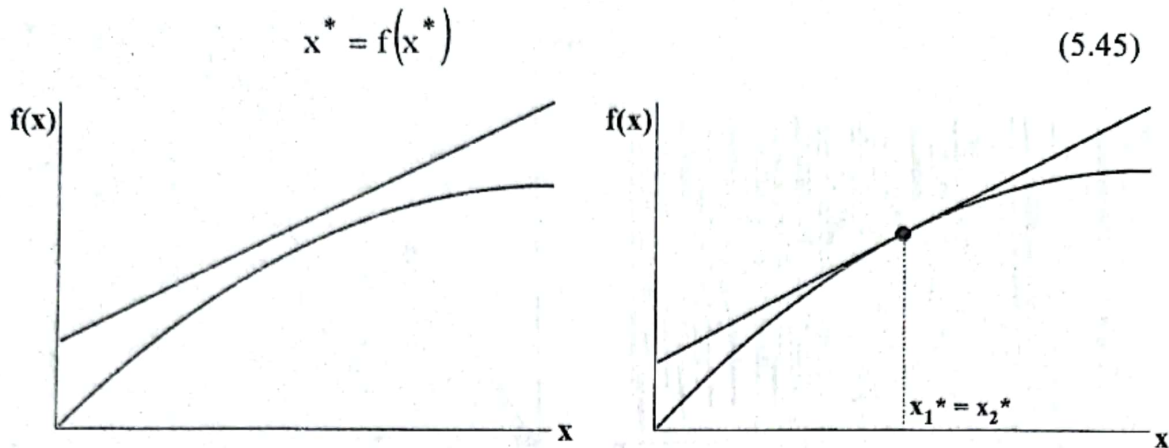


Fig. 5.12 a

Fig. 5.12 b

În acord cu ecuația (5.45), punctele fixe se obțin la intersecția primei bisectoare a axelor de coordonate cu graficul funcției f . Pentru $\mu < 0$, nu există nici un punct de intersecție, deci aplicația (5.42) nu admite punct fix (fig. 5.12 a). Pentru $\mu = 0$, ecuația de punct fix (5.45) admite rădăcină dublă (fig. 5.12 b). Dreapta $y = x$ este tangentă la graficul funcției $f(x)$, iar punctul fix are stabilitate marginală. Pentru $\mu > 0$, aplicația (5.42) admite două puncte fixe, $x_1^* = -\sqrt{\mu}$, care este instabil și $x_2^* = \sqrt{\mu}$, care este stabil (fig. 5.12 c). Diagrama de bifurcație este trasată în fig. 5.12 d. În $\mu = 0$ are loc o bifurcație nod-șea. Datorită faptului că, în punctul de bifurcație, prima bisectoare este tangentă la graficul lui f (fig. 5.12 b), aceasta se mai numește și *bifurcație tangentă*.

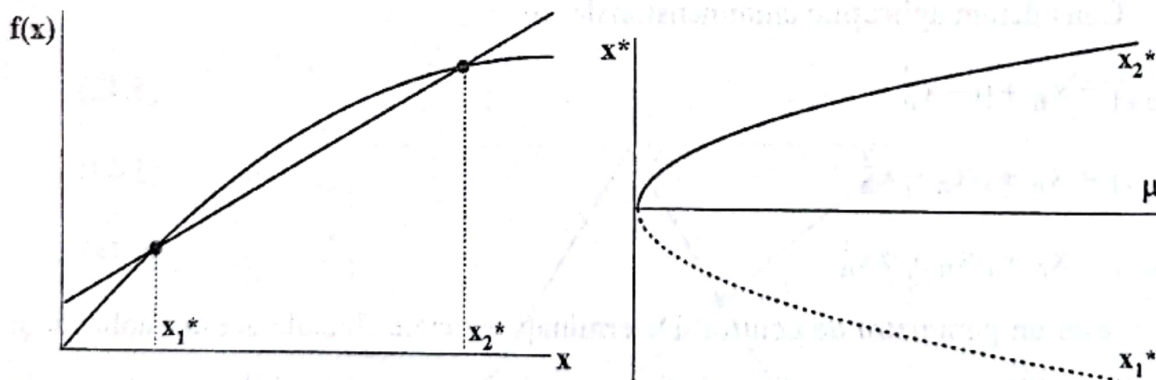


Fig. 5.12 c

Fig. 5.12 d

b) Aplicația (5.43) admite, pentru orice valoare a parametrului de bifurcație, două puncte fixe

$$x_1^* = 0 \text{ și } x_2^* = \mu \quad (5.46)$$

Panta tangentei în punctul fix este

$$f'(x) = 1 + \mu - 2x^* \quad (5.47)$$

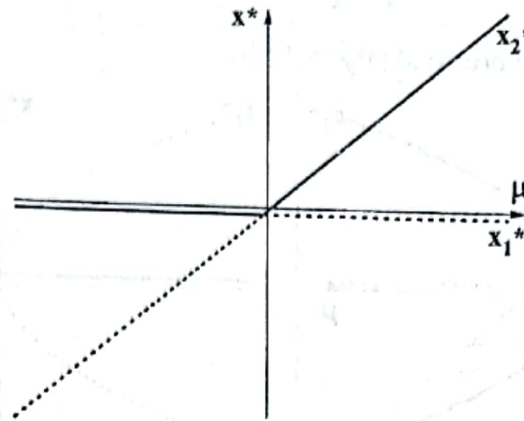


Fig. 5.13

Înlocuind (5.46) în (5.47), se obține pentru cele două puncte fixe

$$|f'(x)|_{x_1^*} = 1 + \mu; |f'(x)|_{x_2^*} = 1 - \mu \quad (5.48)$$

Punctul fix $x_1^* = 0$ este stabil pentru $\mu < 0$ și instabil pentru $\mu > 0$. Punctul fix $x_2^* = \mu$ este stabil pentru $\mu > 0$ și instabil pentru $\mu < 0$. Diagrama de bifurcație este prezentată în fig. 5.13. În $\mu = 0$ are loc o bifurcație transcritică.

c) Aplicația (5.44) admite punctul fix

$$x_1^* = 0 \quad (5.49)$$

pentru orice valoare a parametrului de control și punctele fixe

$$x_{2,3}^* = \pm \sqrt{-\frac{\mu}{\alpha}} \quad (5.50)$$

care există pentru $\frac{\mu}{\alpha} < 0$. Derivata în punctul fix este

$$f'(x)|_{x^*} = 1 + \mu + 3\alpha(x^*)^2 \quad (5.51)$$

Înlocuind (5.49) în (5.51), se obține că

$$f'(x)|_{x_1^*} = 1 + \mu$$

Punctul fix $x_1^* = 0$ este stabil pentru $\mu < 0$ și instabil pentru $\mu > 0$, indiferent de valoarea parametrului α . Pentru celelalte două puncte fixe, sînt posibile situațiile:

a) $\alpha < 0$. Punctele fixe $x_{2,3}^* = \pm \sqrt{-\frac{\mu}{\alpha}}$ există pentru $\mu > 0$ și sînt stabile. În $\mu = 0$ are loc o bifurcație furcă supercritică (fig. 5.14 a).

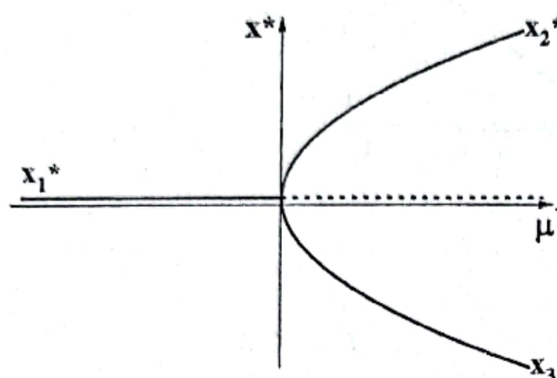


Fig. 5.14 a

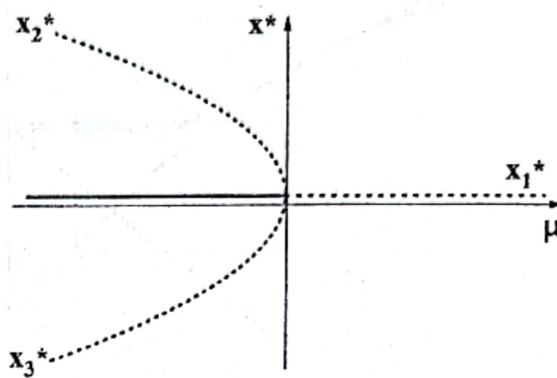


Fig. 5.14 b

b) $\alpha > 0$. Punctele fixe $x_{2,3}^* = \pm \sqrt{-\frac{\mu}{\alpha}}$ există pentru $\mu < 0$ și sînt instabile. În $\mu = 0$ are loc o bifurcație furcă subcritică (fig. 5.14 b).

Aplicația 5.4

Considerăm aplicația cortului [6]

$$x_{n+1} = \begin{cases} 2ax_n, & 0 \leq x_n \leq 1/2 \\ 2a(1-x_n), & 1/2 \leq x_n \leq 1 \end{cases} \quad (5.52)$$

definită pe intervalul $[0,1]$. Determinați punctele fixe ale acesteia și analizați stabilitatea lor.

Rezolvare

Aplicația (5.52) admite punctele fixe

$$x_1^* = 0; \quad x_2^* = \frac{2a}{1+2a} \quad (5.53)$$

Primul punct fix există pentru orice valoare a parametrului de control a . Al doilea punct fix trebuie să satisfacă $x_2^* > 1/2$, deci va exista pentru $a \geq 1/2$. Derivata în punctul fix este

$$f'(x)|_{x^*} = \begin{cases} 2a, & 0 \leq x^* \leq \frac{1}{2} \\ -2a, & \frac{1}{2} \leq x^* \leq 1 \end{cases}$$

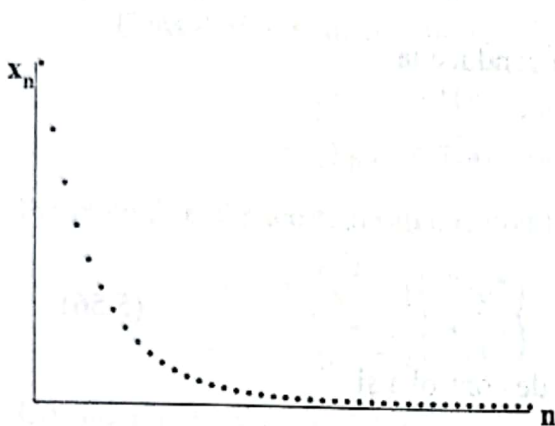


Fig. 5.15 a

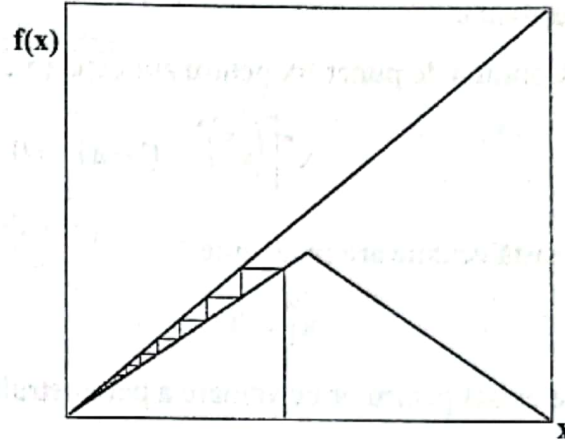


Fig. 5.15 b

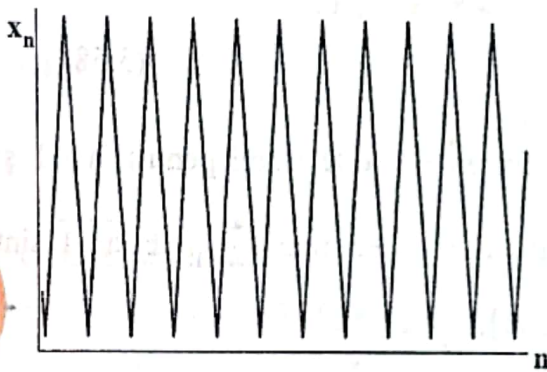


Fig. 5.15 c

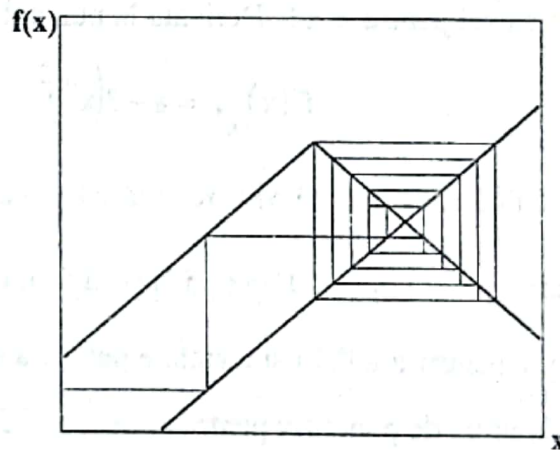


Fig. 5.15 d

Rezultă că punctul fix x_1^* este singurul punct fix și este stabil pentru $0 < a < \frac{1}{2}$ (fig.

5.15 a și b). Pentru $a > \frac{1}{2}$, ambele puncte fixe, x_1^* și x_2^* , sînt instabile. Sistemul prezintă o bifurcație cu dublare de perioadă, în urma căreia apare o orbită biperiodică stabilă (fig. 5.15 c și d).

Aplicația 5.5

Considerăm aplicațiile discrete [6]

$$a) x_{n+1} = ax_n - x_n^3 \quad (5.54)$$

$$b) x_{n+1} = ax_n + x_n^3 \quad (5.55)$$

Determinați punctele fixe și studiați stabilitatea acestora.

Rezolvare

a) Condiția de punct fix pentru aplicația (5.54) conduce la

$$x^* \left[(x^*)^2 + (1-a) \right] = 0$$

Această ecuație are rădăcinile

$$x_1^* = 0 \quad (5.56)$$

care există pentru orice valoare a parametrului de control a și

$$x_{2,3}^* = \pm \sqrt{a-1} \quad (5.57)$$

care există pentru $a \geq 1$. Derivata în punctul fix este

$$f'(x)|_{x^*} = a - 3(x^*)^2 \quad (5.58)$$

Înlocuind (5.56) în (5.58), rezultă că punctul fix $x_1^* = 0$ este stabil pentru $|a| < 1$ și instabil pentru $|a| > 1$. Din (5.57) și (5.58), rezultă că punctele fixe $x_{2,3}^* = \pm \sqrt{a-1}$ sînt stabile pentru $a \in (1, 2)$ și instabile pentru $a \in (2, \infty)$.

b) Condiția de punct fix pentru aplicația (5.55) conduce la

$$x^* \left[(x^*)^2 + (a-1) \right] = 0$$

Această ecuație are rădăcinile

$$x_1^* = 0 \quad (5.59)$$

care există pentru orice valoare a parametrului de control a și

$$x_{2,3}^* = \pm \sqrt{1-a} \quad (5.60)$$

care există pentru $a \leq 1$. Derivata în punctul fix este

$$f'(x)|_{x^*} = a + 3(x^*)^2 \quad (5.61)$$

Înlocuind (5.59) în (5.61), rezultă că punctul fix $x_1^* = 0$ este stabil pentru $|a| < 1$ și instabil pentru $|a| > 1$. Din (5.60) și (5.61), rezultă că punctele fixe $x_{2,3}^* = \pm \sqrt{1-a}$ sînt

instabile pe domeniul de existență.

5.3. Puncte fixe ale aplicațiilor discrete bidimensionale

Considerăm aplicația discretă bidimensională

$$\begin{cases} x_{n+1} = f(x_n, y_n) \\ y_{n+1} = g(x_n, y_n) \end{cases} \quad (5.62)$$

Punctele fixe ale acestora satisfac condițiile [16]

$$\begin{cases} x^* = f(x^*, y^*) \\ y^* = g(x^*, y^*) \end{cases} \quad (5.63)$$

Considerăm soluția perturbată

$$\begin{cases} x_n = x^* + \xi_n \\ y_n = y^* + \zeta_n \end{cases} \quad (5.64)$$

unde

$$\delta_n = \begin{pmatrix} \xi_n \\ \zeta_n \end{pmatrix} \quad (5.65)$$

constituie perturbația în iterația n . Înlocuind (5.64) în (5.62), rezultă că

$$\begin{cases} x^* + \xi_{n+1} = f(x^* + \xi_n, y^* + \zeta_n) \\ y^* + \zeta_{n+1} = g(x^* + \xi_n, y^* + \zeta_n) \end{cases} \quad (5.66)$$

Dezvoltăm funcțiile f și g în serie Taylor în jurul punctului fix. În aproximația micilor perturbații, reținem doar termenii liniari în perturbații

$$\begin{cases} x^* + \xi_{n+1} \approx f(x^*, y^*) + \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_* \xi_n + \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_* \zeta_n \\ y^* + \zeta_{n+1} \approx g(x^*, y^*) + \frac{\partial g}{\partial x} \Big|_* \xi_n + \frac{\partial g}{\partial y} \Big|_* \zeta_n \end{cases}$$

Ținând cont de condiția de punct fix (5.63), rezultă că perturbațiile satisfac ecuația liniară

$$\begin{cases} \xi_{n+1} \approx \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_* \xi_n + \frac{\partial f}{\partial y} \Big|_* \zeta_n \\ \zeta_{n+1} \approx \frac{\partial g}{\partial x} \Big|_* \xi_n + \frac{\partial g}{\partial y} \Big|_* \zeta_n \end{cases} \quad (5.67)$$

sau, matriceal, cu notația (5.65)

$$\delta_{n+1} = L\delta_n \quad (5.68)$$

unde matricea L este dată de

$$L = \begin{pmatrix} \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_* & \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_* \\ \left. \frac{\partial g}{\partial x} \right|_* & \left. \frac{\partial g}{\partial y} \right|_* \end{pmatrix} \quad (5.69)$$

și reprezintă matricea Jacobiană asociată sistemului (5.62), evaluată la punctul fix. Ecuația liniară (5.68) are soluții de forma

$$\begin{cases} \xi_n = A\lambda^n \\ \zeta_n = B\lambda^n \end{cases} \quad (5.70)$$

Înlocuind (5.70) în (5.68), se obține

$$\begin{cases} A\lambda^{n+1} = L_{11}A\lambda^n + L_{12}B\lambda^n \\ B\lambda^{n+1} = L_{21}A\lambda^n + L_{22}B\lambda^n \end{cases}$$

de unde

$$\begin{cases} A(L_{11} - \lambda) + BL_{12} = 0 \\ L_{21}A + (L_{22} - \lambda)B = 0 \end{cases}$$

Aceasta admite soluție nebanală numai dacă este satisfăcută ecuația caracteristică

$$\begin{vmatrix} L_{11} - \lambda & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (5.71)$$

care poate fi scrisă

$$\lambda^2 - T\lambda + \Delta = 0$$

Valorile proprii ale matricei L sînt date de

$$\lambda_{1,2} = \frac{T \pm \sqrt{T^2 - 4\Delta}}{2} \quad (5.72)$$

unde T și Δ sînt trasa, respectiv determinantul matricei L

$$\begin{cases} T = L_{11} + L_{22} \\ \Delta = L_{11}L_{22} - L_{12}L_{21} \end{cases}$$

Soluția generală a ecuației (5.68) este dată de

$$\begin{cases} \xi_n = A_1 \lambda_1^n + A_2 \lambda_2^n \\ \zeta_n = B_1 \lambda_1^n + B_2 \lambda_2^n \end{cases} \quad (5.73)$$

În funcție de valorile parametrilor T și Δ , sînt posibile situațiile sintetizate în fig. 5.16 [16].

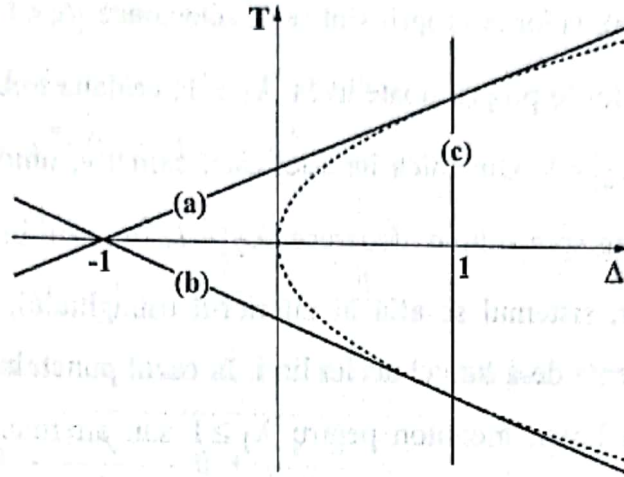


Fig. 5.16

Valorile proprii (5.72) pot fi reale sau complex conjugate. În fig. 5.16 am reprezentat cu linie întreruptă parabola $T^2 = 4\Delta$. În interiorul acesteia valorile proprii sînt complexe iar în afara acesteia valorile proprii sînt reale.

Dacă ambele valori proprii sînt în interiorul cercului de rază unitate, $|\lambda_{1,2}| < 1$, în conformitate cu (5.70), $\delta_n \rightarrow 0$ și punctul fix este stabil. Căutăm zona din spațiul parametrilor (Δ, T) pentru care această condiție este satisfăcută.

a) Dacă $\lambda_1 = 1$, atunci

$$\begin{cases} T = 1 + \lambda_2 \\ \Delta = \lambda_2 \end{cases}, \text{ deci } T = 1 + \Delta \quad (5.74)$$

b) Dacă $\lambda_1 = -1$, atunci

$$\begin{cases} T = -1 + \lambda_2 \\ \Delta = -\lambda_2 \end{cases}, \text{ deci } T = -1 - \Delta \quad (5.75)$$

c) Dacă rădăcinile sînt complex conjugate, $|\lambda|^2 = 1 \Rightarrow \Delta = 1$ (5.76)

Cele trei drepte sînt marcate cu (a), (b) și (c) în fig. 5.16. În interiorul triunghiului delimitat de acestea, $|\lambda_{1,2}| < 1$, iar în exterior modulul pentru cel puțin una dintre

valorile proprii este supraunitar.

- a) la intersectarea dreptei $T = 1 + \Delta$ are loc un proces numit de *divergență*.
- b) la intersectarea dreptei $T = -1 - \Delta$ are loc un proces de *divergență alternantă*.
- c) la intersectarea dreptei $\Delta = 1$, are loc o *bifurcație Neimark (Hopf)*.

În cazurile (a) și (b), valorile proprii sînt reale. Deoarece $|\Delta| < 1$, rezultă că $|\lambda_1 \lambda_2| < 1$.

Doar una dintre valorile proprii poate avea $|\lambda_1| > 1$, cealaltă trebuie să fie în interiorul cercului unitate, $|\lambda_2| < 1$. Dinamica iterației este, calitativ, unidimensională. Punctele $P_n(x_n, y_n)$ converg spre o linie, deoarece $|\lambda_2| < 1$. În cazul unui punct fix stabil (în planul parametrilor, sistemul se află în interiorul triunghiului, în fig. 5.16), apoi se realizează convergența de-a lungul acelei linii. În cazul punctului fix instabil, punctele diverg de-a lungul liniei, monoton pentru $\lambda_1 \geq 1$ sau alternant, pentru $\lambda_1 \leq -1$. În cazul (c), o pereche de valori proprii complex conjugate intersectează simultan cercul unitate.

- Dacă $\text{Re } \lambda > 0$, punctul reprezentativ spiralează spre interior (spre punctul fix) în regiunea de stabilitate și spre exterior în regiunea de instabilitate. În punctul de bifurcație, stabilitatea este neutră și punctul reprezentativ se deplasează pe o orbită eliptică.

- Dacă $\text{Re } \lambda < 0$, punctul reprezentativ spiralează și oscilează simultan [16] (prin oscilație aici, se înțelege 'pendularea' de o parte și de alta a axei x și y , datorită alternanței semnelor perturbațiilor).

Aplicația 5.6

Considerăm aplicația discretă bidimensională [6]

$$\begin{cases} x_{n+1} = a + x_n + ay_n + x_n^2 \\ y_{n+1} = \frac{1}{2}y_n + ax_n + x_n^2 \end{cases} \quad (5.77)$$

unde a este un parametru de control. Determinați punctele fixe și demonstrați că originea suferă o bifurcație nod-șea pentru $a = 0$.

Rezolvare

Condiția de punct fix pentru aplicația (5.77) este

$$\begin{cases} x^* = a + x^* + ay^* + x^{*2} \\ y^* = \frac{1}{2}y^* + ax^* + x^{*2} \end{cases} \quad (5.78)$$

Din a doua ecuație (5.78), rezultă că

$$y^* = 2ax^* + 2x^{*2} \quad (5.79)$$

Înlocuind (5.79) în prima ecuație (5.78), rezultă

$$x^{*2}(1+2a) + 2a^2x^* + a = 0 \quad (5.80)$$

Discriminantul acestei ecuații este

$$D_1 = 4a(a+1)(a^2 - a - 1) \quad (5.81)$$

Tabelul de variație a semnelui lui D_1 este prezentat mai jos.

a	-	-	-1	-	$\frac{1-\sqrt{5}}{2}$	-	0	+	$\frac{1+\sqrt{5}}{2}$	+	+			
a+1	-	-	0	+	+	+	+	+	+	+	+			
a ² -a-1	+	+	+	0	-	-	-	0	+	+	+			
D ₁	+	+	0	-	-	0	+	0	-	-	0	+	+	+

Sistemul (5.77) admite două puncte fixe pentru $a \in (-\infty, -1) \cup \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}, 0\right) \cup \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}, \infty\right)$.

Pe acest domeniu, rădăcinile ecuației (5.80) sînt

$$x_{1,2}^* = \frac{-a^2 \pm \sqrt{a(a+1)(a^2 - a - 1)}}{1+2a} \quad (5.82)$$

Înlocuind (5.82) în (5.79), se obține

$$y_{1,2}^* = \frac{2a}{(1+2a)^2} \left[-(1+2a)^2 \pm \sqrt{a(a+1)(a^2 - a - 1)} \right] \quad (5.83)$$

În acord cu (5.77), ecuația caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} 1+2x^* - \lambda & a \\ a+2x^* & \frac{1}{2} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (5.84)$$

Aceasta se poate scrie sub forma

$$\lambda^2 - T\lambda + \Delta = 0 \quad (5.85)$$

unde

$$\begin{cases} T = 2x^* + \frac{3}{2} \\ \Delta = x^*(1-2a) + \frac{1}{2} - a^2 \end{cases} \quad (5.86)$$

Din (5.82), rezultă că, pentru $a = 0$, $x_1^* = x_2^* = 0$. Înlocuind această valoare în (5.86) rezultă că, pentru $a = 0$, este satisfăcută condiția (5.74)

$$T = \Delta + 1$$

Domeniul de stabilitate din fig. 5.16 este părăsit prin latura notată cu (a), când parametrul de control a devine negativ. Din (5.82) și (5.86) rezultă că pentru x_1^* este satisfăcută condiția $T > \Delta + 1$, în timp ce pentru x_2^* avem $T < \Delta + 1$. Rezultă că în $a = 0$ apare, la scăderea lui a , o pereche de stări staționare, dintre care x_1^* este instabilă și x_2^* este stabilă. Rezultă că are loc o bifurcație nod-șea (fig. 5.17).

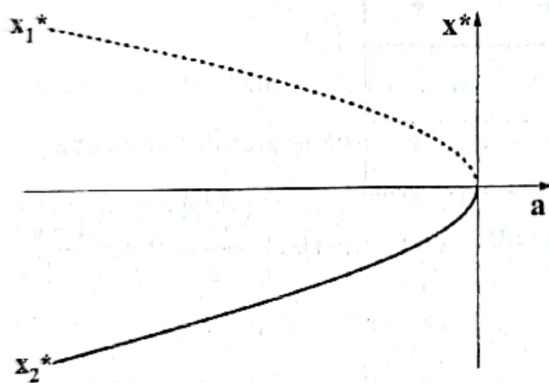


Fig. 5.17

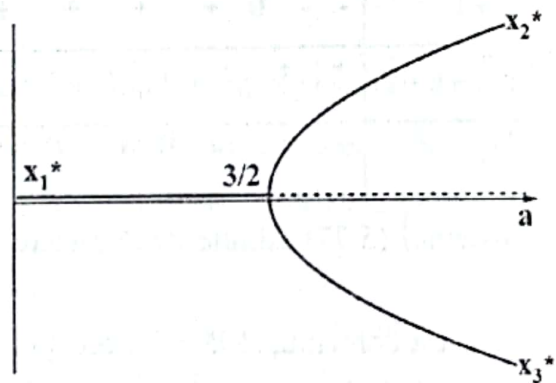


Fig. 5.18

Aplicația 5.7

Considerăm aplicația discretă bidimensională

$$\begin{cases} x_{n+1} = y_n \\ y_{n+1} = -\frac{1}{2}x_n + ay_n - y_n^3 \end{cases} \quad (5.87)$$

unde a este un parametru de control. Determinați punctele fixe ale aplicației (5.87) și

arătați că în $a = \frac{3}{2}$ are loc o bifurcație furcă.

Rezolvare

Condiția de punct fix pentru aplicația (5.87) este

$$\begin{cases} x^* = y^* \\ y^* = -\frac{1}{2}x^* + ay^* - y^{*3} \end{cases} \quad (5.88)$$

Soluțiile acestui sistem sînt

$$x_1^* = 0 \quad (5.89)$$

care există pentru orice valoare a parametrului de control, și

$$x_{2,3}^* = \pm \sqrt{a - \frac{3}{2}} \quad (5.90)$$

care există pentru $a \geq 3/2$. A doua variabilă este $y^* = x^*$. Ecuația caracteristică este

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ -\frac{1}{2} & a - 3y^{*2} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (5.91)$$

Pentru primul punct fix, dat de (5.89), ecuația caracteristică devine

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ -\frac{1}{2} & a - \lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 - a\lambda + \frac{1}{2} = 0 \quad (5.92)$$

Rezultă că

$$\begin{cases} T = a \\ \Delta = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (5.93)$$

Ca urmare, pentru $a < 3/2$ rezultă că $T < \Delta + 1$ și punctul fix 1 este stabil. Pentru $a > 3/2$, acesta devine instabil, cu apariția a două noi puncte fixe, date de (5.90).

Înlocuind (5.90) în (5.91), ecuația caracteristică este

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ -\frac{1}{2} & -2a + \frac{9}{2} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 + \left(2a - \frac{9}{2}\right)\lambda + \frac{1}{2} = 0 \quad (5.94)$$

Rezultă că parametrii T și Δ sînt dați de

$$\begin{cases} T = -2a + \frac{9}{2} \\ \Delta = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (5.95)$$

Pentru $a > 3/2$, din (5.95) rezultă că $T < \Delta + 1$ și, ca urmare, stările staționare nou apărute sînt stabile. Rezultă că, în $a = 3/2$, are loc o bifurcație furcă (fig. 5.18).

Aplicația 5.8

Considerăm următoarele aplicații discrete bidimensionale, liniare [12]

$$a) \begin{cases} x_{n+1} = 0.9x_n \\ y_{n+1} = 0.8y_n \end{cases} \quad (5.96)$$

$$b) \begin{cases} x_{n+1} = 0.9x_n \\ y_{n+1} = -0.8y_n \end{cases} \quad (5.97)$$

$$c) \begin{cases} x_{n+1} = 1.1x_n \\ y_{n+1} = 1.2y_n \end{cases} \quad (5.98)$$

$$d) \begin{cases} x_{n+1} = 1.1x_n \\ y_{n+1} = 0.9y_n \end{cases} \quad (5.99)$$

$$e) \begin{cases} x_{n+1} = \alpha x_n + \beta y_n \\ y_{n+1} = -\beta x_n + \alpha y_n \end{cases}, \text{ unde } \beta \neq 0 \quad (5.100)$$

Trasați portretul fazelor pentru acestea.

Rezolvare

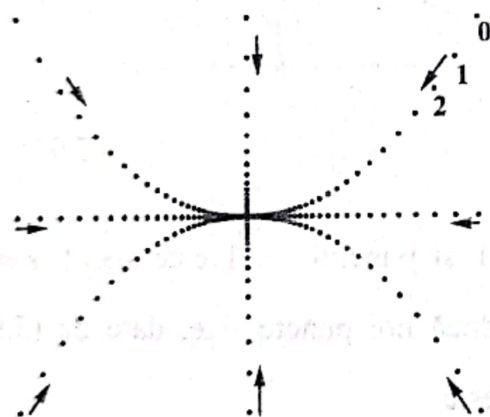


Fig. 5.19

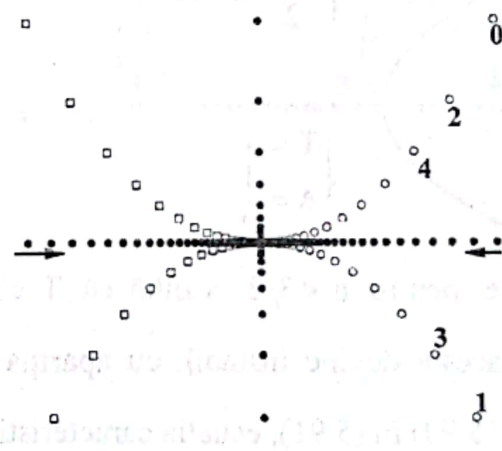


Fig. 5.20

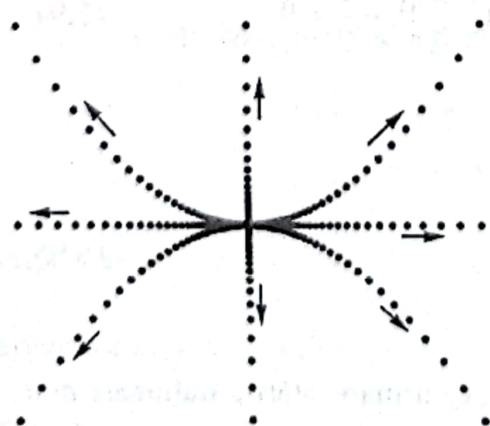


Fig. 5.21

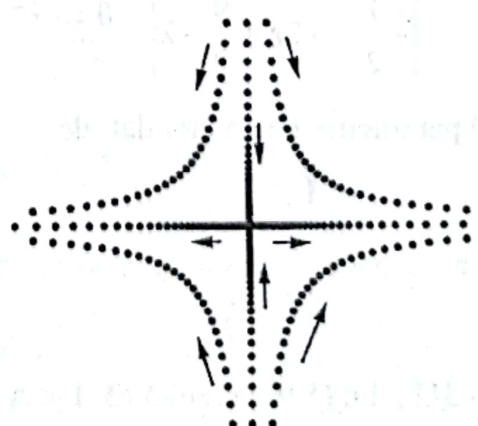


Fig. 5.22

a) Sistemul (5.96) admite punctul fix $(x^*, y^*) = (0, 0)$. Deoarece valorile proprii sînt

$$\lambda_1 = 0,9; \lambda_2 = 0,8$$

rezultă că punctul fix este asimptotic stabil. În portretul fazelor (fig. 5.19), acesta este un nod stabil. Toate traiectoriile fazice converg către acesta. În fig. 5.19 sînt reprezentate, în coordonate (x, y) , iterațiile corespunzătoare la diferite condiții inițiale.

b) Sistemul (5.97) admite punctul fix $(x^*, y^*) = (0, 0)$. Deoarece valorile proprii sînt

$\lambda_1 = 0,9; \lambda_2 = -0,8$, rezultă că punctul fix este asimptotic stabil. În portretul fazelor (fig. 5.20), acesta este un nod stabil. Toate traiectoriile fazice converg către acesta. Datorită valorii negative a lui λ_2 , după direcția y convergența are loc alternant.

c) Sistemul (5.98) admite punctul fix $(x^*, y^*) = (0, 0)$. Deoarece valorile proprii sînt

$\lambda_1 = 1,1; \lambda_2 = 1,2$, rezultă că punctul fix este instabil. În portretul fazelor (fig. 5.21), acesta este un nod instabil. Toate traiectoriile fazice diverg în raport cu punctul fix.

d) Sistemul (5.88) admite punctul fix $(x^*, y^*) = (0, 0)$. Deoarece valorile proprii sînt

$\lambda_1 = 1,1; \lambda_2 = 0,9$, rezultă că punctul fix este instabil. În portretul fazelor (fig. 5.22), acesta este un punct șea. După direcția x are loc divergența traiectoriilor iar după direcția y are loc convergența acestora.

e) Sistemul (5.100) admite punctul fix $(x^*, y^*) = (0, 0)$. Valorile proprii sînt

$$\lambda_{1,2} = \alpha \pm i\beta \quad (5.101)$$

Scriem aceste numere complexe în reprezentare polară

$$\begin{cases} \alpha = \rho \cos \theta \\ \beta = \rho \sin \theta \end{cases} \quad (5.102)$$

unde $\rho = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}$, iar $\theta \in (-\pi, \pi)$. Cu (5.102), matricea coeficienților pentru aplicația (5.100) este

$$A = \rho \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \quad (5.103)$$

Cu ajutorul matricei A , aplicația (5.100) poate fi scrisă

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ y_{n+1} \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} x_n \\ y_n \end{pmatrix} \quad (5.104)$$

Calculul iterației de ordin n este echivalent cu aplicarea lui A^n asupra vectorului de stare inițial,

$$\begin{pmatrix} x_n \\ y_n \end{pmatrix} = A^n \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} \quad (5.105)$$

Din (5.103) și (5.105), rezultă că

$$\begin{pmatrix} x_n \\ y_n \end{pmatrix} = \rho^n \begin{pmatrix} \cos n\theta & \sin n\theta \\ -\sin n\theta & \cos n\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} \quad (5.106)$$

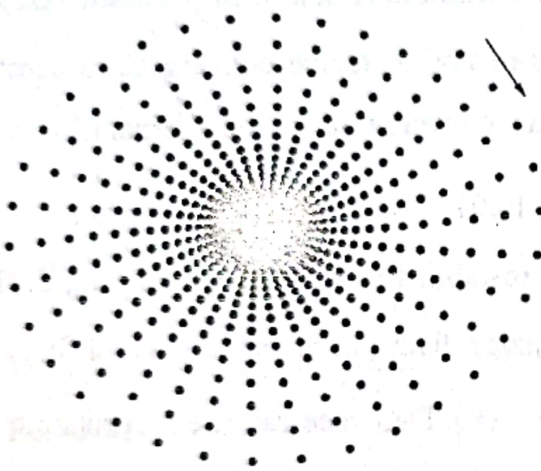


Fig. 5.23 a

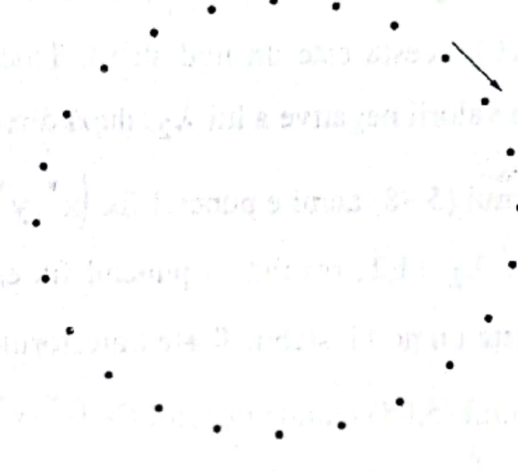


Fig. 5.23 b

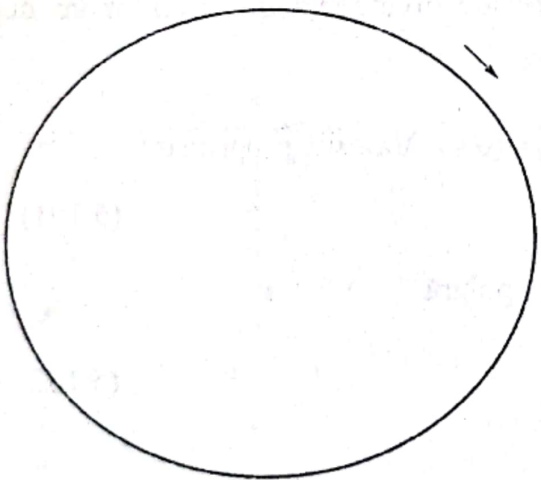


Fig. 5.23 c

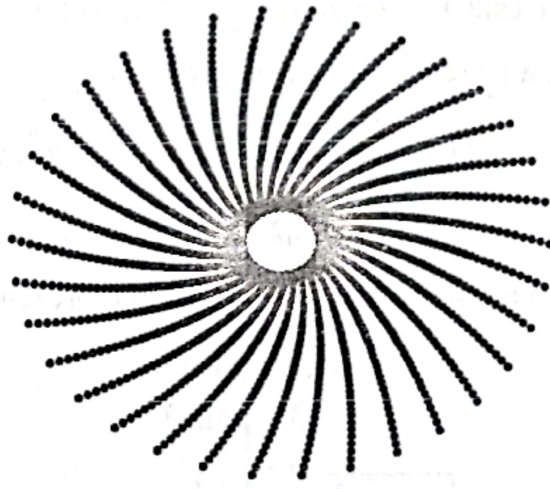


Fig. 5.23 d

Transformarea (5.106) este echivalentă cu rotația vectorului inițial de stare cu $n\theta$ și înmulțirea moduluiui acestuia cu ρ^n . Sînt posibile situațiile:

1. Dacă $\rho < 1$, originea este asimptotic stabilă (fig. 5.23 a);
2. Dacă $\rho > 1$, originea este instabilă (fig. 5.23 d);
3. Dacă $\rho = 1$, traiectoria fazică este circulară. Dacă $\theta/2\pi$ este rațional, orbita este

alcătuită dintr-un număr finit de puncte (fig. 5.23 b). Dacă $\theta/2\pi$ este irațional, orbita este densă (este alcătuită dintr-un număr infinit de puncte, fig. 5.23 c). La trecerea prin $\rho = 1$, are loc o bifurcație Neimark.

Aplicația 5.9

Considerăm recurența unidimensională de ordinul al doilea [12]

$$z_{n+1} = \mu z_n (1 - z_{n-1}) \quad (5.107)$$

numită aplicația logistică cu întârziere (din cauză că, în paranteză, apare z_{n-1} în loc de z_n), unde μ este un parametru real pozitiv. Determinați punctele fixe și studiați stabilitatea acestora.

Rezolvare

Reducem recurența (5.107) la o recurență bidimensională de ordinul I, cu ajutorul transformării

$$\begin{cases} x_n = z_{n-1} \\ y_n = z_n \end{cases} \quad (5.108)$$

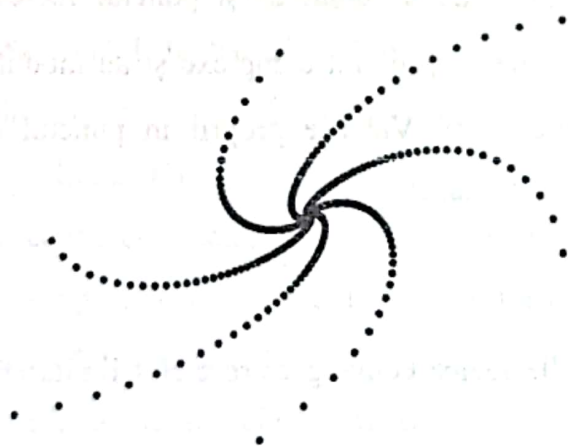


Fig. 5.24 a

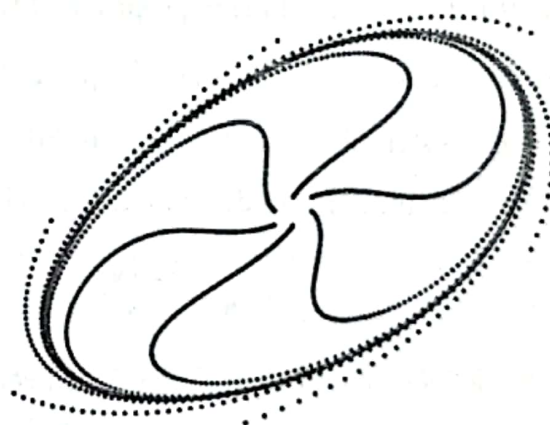


Fig. 5.24 b

Cu (5.108), iterația (5.107) devine

$$\begin{cases} x_{n+1} = y_n \\ y_{n+1} = \mu y_n (1 - x_n) \end{cases} \quad (5.109)$$

Aplicația (5.109) admite două puncte fixe

$$x_1^* = y_1^* = 0 \text{ și } x_2^* = y_2^* = 1 - \frac{1}{\mu} \quad (5.110)$$

Matricea Jacobiană este

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\mu y^* & \mu(1-x^*) \end{pmatrix} \quad (5.111)$$

Pentru prima stare staționară, înlocuind (5.110) în (5.111), se obține matricea Jacobiană

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & \mu \end{pmatrix}$$

care are valorile proprii $\lambda_1 = 0$ și $\lambda_2 = \mu$. În consecință, originea este asimptotic stabilă dacă $0 < \mu < 1$ și instabilă dacă $\mu > 1$. Pentru cea de-a doua stare staționară din (5.110), matricea Jacobiană are forma

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1-\mu & 1 \end{pmatrix}$$

iar valorile proprii corespunzătoare sînt

$$\lambda_3 = \frac{1 + \sqrt{5-4\mu}}{2}; \lambda_4 = \frac{1 - \sqrt{5-4\mu}}{2} \quad (5.112)$$

Pentru $1 < \mu < 2$, valorile proprii (5.112) au modulul subunitar și punctul fix este asimptotic stabil (fig. 5.24a). În $\mu = 2$, valorile proprii sînt complexe și au modulul unitar. Sistemul (5.109) suferă o bifurcație Hopf. Valorile proprii în punctul de bifurcație sînt rădăcini de ordinul al șaselea ale unității

$$\lambda_{3,4} = \frac{1 \pm i\sqrt{3}}{2}$$

Dincolo de punctul de bifurcație, traiectoriile fazice converg către ciclul limită (fig. 5.24 b).

6. Dinamică haotică. Scenarii de tranziție spre haos.

În ordinea creșterii complexității, un sistem dinamic poate prezenta, în linii mari, următoarele tipuri de comportamente dinamice:

- staționaritate. Variabilele de stare tind la o valoare constantă în timp. Atractorul este un punct fix al spațiului fazelor.
- comportament periodic de tip ciclu limită. Sistemul prezintă un comportament periodic în timp. Atractorul este o curbă închisă din spațiul fazelor (ciclul limită).
- comportament cuasiperiodic. În sistem se manifestă două frecvențe, aflate în raport irațional. Atractorul este un tor.
- comportament haotic. Evoluția în timp este complet neregulată, impredictibilă. Sistemul prezintă proprietatea de *sensibilitate în raport cu condițiile inițiale*: două traiectorii fazice inițial vecine diverg după un timp suficient de lung, până devin complet necorelate. Atractorul corespunzător sistemelor haotice este un obiect de dimensiune fracționară (fractal) și se numește *atractor straniu*.

Atât investigațiile teoretice cât și cele experimentale au arătat că există mai multe moduri de tranziție spre haos [16]:

1. Scenariul de tranziție prin bifurcația torului (scenariul Newhouse - Ruelle - Takens)

Landau considera tranziția spre haos produsă printr-o secvență infinită de bifurcații Hopf secundare: după o primă bifurcație Hopf de la starea staționară la ciclu limită, apare o succesiune de bifurcații a unor tori, fiecare bifurcație adăugând încă o frecvență fundamentală. Pe măsură ce numărul de frecvențe crește, mișcarea devine din ce în ce mai turbulentă. Acest scenariu nu a fost confirmat experimental.

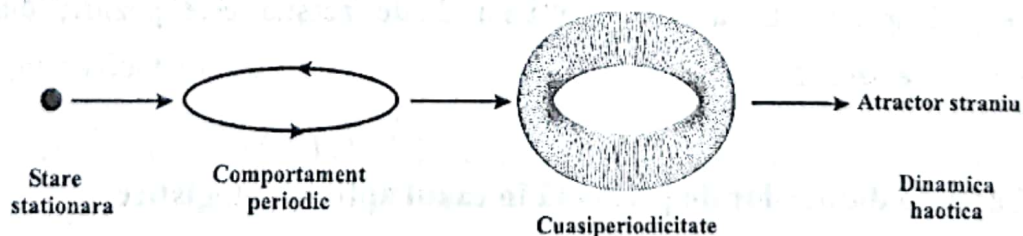


Fig. 6.1

Un alt scenariu de tranziție spre haos, bazat pe bifurcația torului, a fost propus de Newhouse, Ruelle și Takens. Starea staționară devine instabilă și are loc trecerea la o orbită periodică printr-o bifurcație Hopf. Crescând mai mult valoarea parametrului de

control, are loc tranziția la un tor. Sistemul are un comportament cuasiperiodic. Când este pe punctul de apariție a treia frecvență, torul devine instabil și apare un atractor straniu. Acest scenariu a fost observat în experimente de tipul convecției Bénard. Fig. 6.1 prezintă succesiunea de atractori corespunzătoare acestei tranziții.

2. Cascada dublărilor de perioadă

Acest tip de tranziție spre haos apare, de exemplu, în cazul aplicației logistice. Tranziția spre haos se face printr-o succesiune infinită de bifurcații cu dublarea perioadei. Această secvență a fost găsită în multe experimente, incluzând reacții chimice și convecția Bénard.

3. Tranziția prin intermitențe

Scenariul tranzițiilor spre haos prin *intermitențe* a fost propus de Pomeau și Manneville [15]. În cazul comportamentului intermitent, sistemul prezintă oscilații care sînt periodice pentru un interval dat de timp, întrerupte de "explozii" de oscilații aperiodice de durată finită. După încetarea "exploziei", o nouă fază periodică începe și ciclul se repetă. Există trei tipuri de tranziție spre haos prin intermitențe. Acest scenariu a fost observat experimental în convecția Bénard.

Aceste trei scenarii prezentate nu sînt singurele posibile. Toate scenariile au în comun faptul că apariția haosului are loc prin bifurcații. Diferitele scenarii nu se "contrazic" reciproc. Ele pot exista în diferite regiuni ale spațiului parametrilor [11].

Există mai multe metode de caracterizare cantitativă a atractorilor haotici. Între acestea, un loc important ocupă calculul exponenților Liapunov. Detalii privind metodele de identificare a atractorilor către care evoluează sistemele dinamice pot fi găsite în [1]. Un sistem n -dimensional, cu timp continuu sau discret, posedă n exponenți Liapunov. Dacă cel puțin unul dintre aceștia este pozitiv, dinamica sistemului este haotică.

6.1. Cascada dublărilor de perioadă în cazul aplicației logistice

În capitolul anterior, am prezentat elementele de bază privind dinamica descrisă de aplicația logistică

$$x_{n+1} = 4\mu x_n (1 - x_n) \quad (6.1)$$

Am văzut că, pe măsură ce parametrul de control μ crește, în sistem apare o succesiune

de bifurcații cu dublare de perioadă care conduce, în final, la o dinamică haotică.

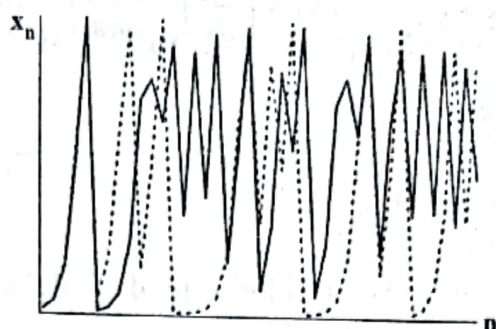


Fig. 6.2

Fig. 6.2 prezintă proprietatea de sensibilitate în raport cu condițiile inițiale în cazul aplicației logistice, cu $\mu = 1$. Condițiile inițiale sînt 0.01, respectiv 0.011.

Ne interesează modul în care se definește exponentul Liapunov în cazul aplicațiilor unidimensionale. Considerăm sistemul discret unidimensional, descris de iterația

$$x_{n+1} = f(x_n) \quad (6.2)$$

Condiția inițială x_0 generează o traiectorie de referință $\{x_i\}$. Studiem stabilitatea traiectoriei de referință prin metoda micilor perturbații. Fie condiția inițială perturbată [4]

$$\tilde{x}_0 = x_0 + \delta x_0 \quad (6.3)$$

După o iterație, traiectoria perturbată este

$$\tilde{x}_1 = x_1 + \delta x_1 \quad (6.4)$$

Din (6.2)-(6.4), rezultă

$$x_1 + \delta x_1 = f(x_0 + \delta x_0) \quad (6.5)$$

Dezvoltăm f în serie Taylor în jurul lui x_0 . Considerînd perturbațiile mici, reținem doar primii doi termeni

$$f(x_0 + \delta x_0) \approx f(x_0) + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_0} \delta x_0 = x_1 + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_0} \delta x_0 \quad (6.6)$$

Din (6.5) și (6.6), rezultă

$$\delta x_1 \approx \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{x_0} \delta x_0 \quad (6.7)$$

În mod analog, se obține

$$\delta x_2 \approx \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x_1} \delta x_1 = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x_0} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x_1} \delta x_0$$

După n iterații, abaterea este

$$\delta x_n = \prod_{i=0}^{n-1} \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x_i} \delta x_0 \quad (6.8)$$

Divergența sau convergența traiectoriilor este dată de caracterul supraunitar sau subunitar al raportului

$$\left| \frac{\delta x_n}{\delta x_0} \right| \quad (6.9)$$

Notăm

$$\prod_{i=0}^{n-1} \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x_i} \right| = Y^n \quad (6.10)$$

Din (6.8) și (6.10), obținem

$$|\delta x_n| = Y^n |\delta x_0| \quad (6.11)$$

Rezultă

$$Y = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\left| \frac{\delta x_n}{\delta x_0} \right| \right)^{1/n} = \prod_{i=0}^{n-1} \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x_i} \right|^{1/n} \quad (6.12)$$

Exponentul Liapunov este

$$\lambda = \log(Y) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \log \left| \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_{x_i} \right| \quad (6.13)$$

Acesta dă convergența ($\lambda < 0$) sau divergența ($\lambda > 0$) traiectoriei perturbate în raport cu traiectoria de referință.

Fig. 6.3 prezintă diagrama de bifurcație și exponentul Liapunov corespunzător pentru valori ale parametrului de control $\mu \in \left(\frac{3}{4}, 1 \right)$, în cazul aplicației logistice.

Valorile negative ale exponentului corespund unui comportament periodic, iar cele pozitive unui comportament haotic [1]. La creșterea valorii parametrului de control, graficul lui λ intersectează abscisa, pentru prima oară, în $\mu_\infty \approx 0,892$, când cascada

dublărilor de perioadă este completă. Se observă că ferestrele periodice existente pentru $\mu > \mu_\infty$ corespund unor valori negative ale exponentului Liapunov.

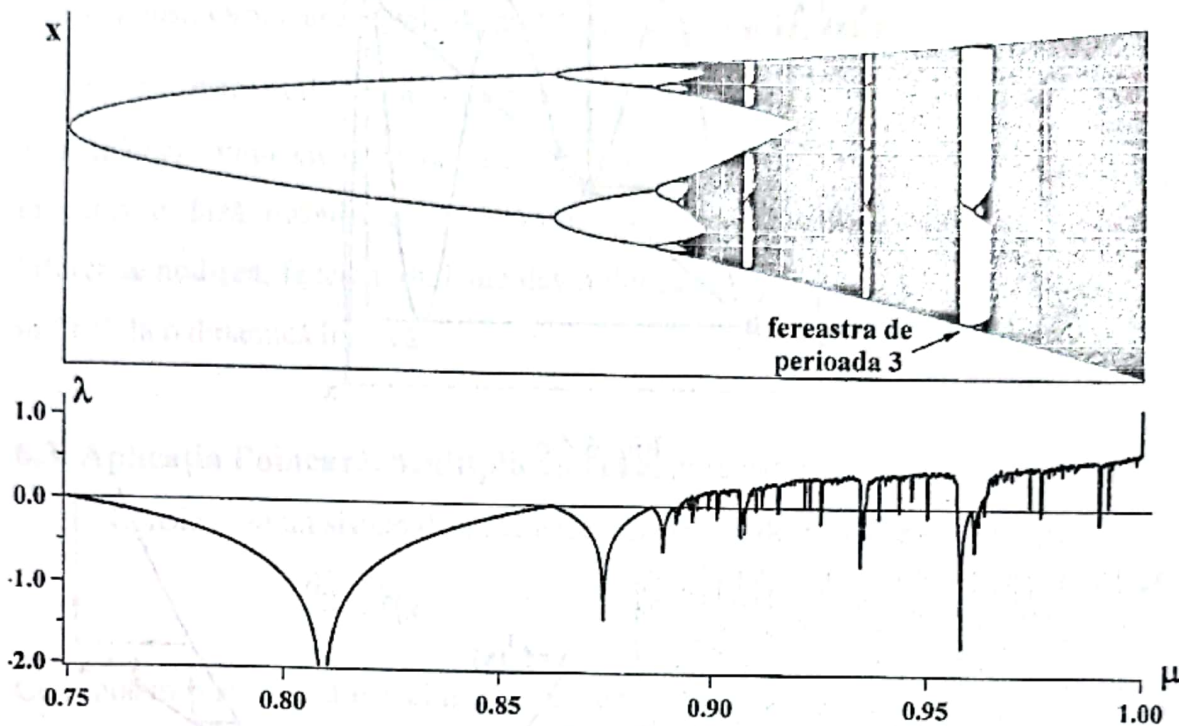


Fig. 6.3

6.2. Intermitențe în cazul aplicației logistice

Ne punem problema care este mecanismul tranzițiilor haotic-periodic pentru ferestrele de periodicitate existente dincolo de μ_∞ . Pentru $\mu = 0.96$, sistemul se află în interiorul ferestrei de perioadă 3, marcate în fig. 6.3 [5].

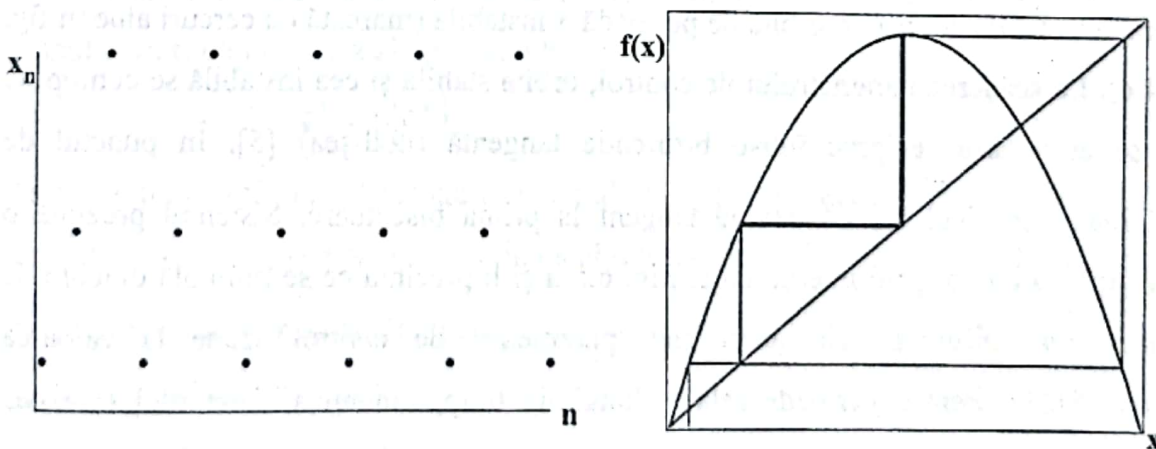


Fig. 6.4 a

Fig. 6.4 b

Fig. 6.4 a și b prezintă evoluția în timp și iterația corespunzătoare. Dat fiind că orbita este de perioadă 3, elementele acesteia trebuie să fie puncte fixe stabile ale aplicației

f^3 (marcate cu cercuri pline în fig. 6.4 c).

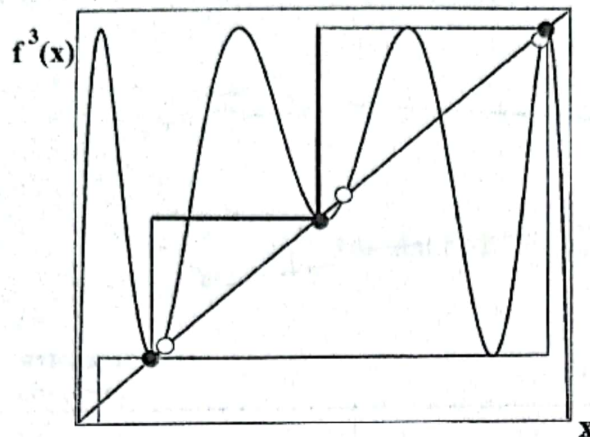


Fig. 6.4 c

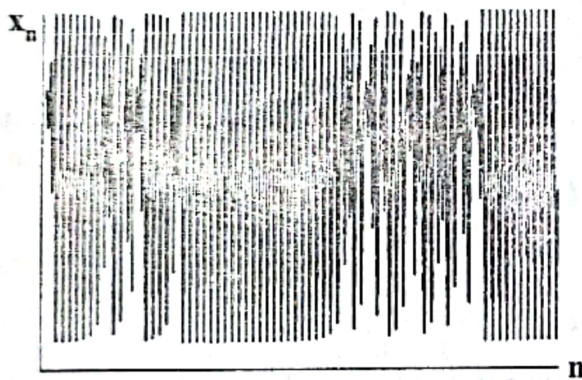


Fig. 6.5 a

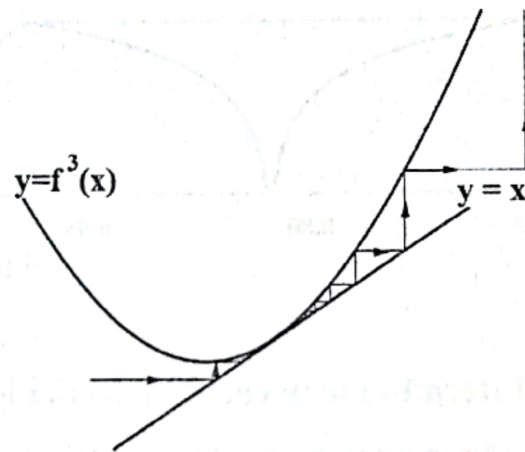


Fig. 6.5 b

În afară de această orbită, aplicația f^3 mai prezintă, pentru această valoare a parametrului de control, o orbită de perioadă 3 instabilă (marcată cu cercuri albe în fig. 6.4 c). La scăderea parametrului de control, orbita stabilă și cea instabilă se contopesc și se anihilează reciproc într-o bifurcație tangentă (nod-șea) [5]. În punctul de bifurcație, graficul lui f^3 devine tangent la prima bisectoare. Sistemul prezintă o tranziție spre haos prin intermitențe. Fig. 6.5 a și b prezintă ce se întâmplă dincolo de punctul de bifurcație (în acest caz, parametrul de control scade la valoarea $\mu = 0.95705$). Pentru perioade relativ lungi de timp, dinamica sistemului este cea anterioară punctului de bifurcație (în acest caz, perioadă 3). Aceste evoluții (numite 'faze laminare') sînt întrerupte de perioade în care dinamica este haotică (numite 'faze turbulente') [15]. Fig. 6.5 b explică prezența ciclului de perioadă 3 în evoluția

temporală, în condițiile în care orbita de perioadă 3 nu mai există. Între diagonala principală și graficul lui f^3 se formează, dincolo de punctul de bifurcație, un canal foarte îngust. Orbita are nevoie de multe iterații pentru a traversa acest canal. Pe durata traversării, este satisfăcută condiția $f^3(x) \approx x$ și, în acest timp, orbita este asemănătoare unui ciclu de perioadă 3 (faza laminară). După traversarea canalului, urmează o fază turbulentă. Pe măsură ce sistemul se depărtează de punctul de bifurcație nod-șea, fazele turbulente devin din ce în ce mai frecvente și sistemul tinde, în final, la o dinamică haotică.

6.3. Aplicația Poincaré. Multiplicatori caracteristici.

Considerăm un sistem de dimensiune n , descris de ecuațiile de evoluție

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = \bar{f}(\bar{x}) \quad (6.14)$$

Cu S notăm o suprafață $n-1$ dimensională de secțiune a traiectoriilor fazice. Alegem S încât să intersecteze traiectoriile fazice; S se numește plan de secțiune Poincaré. Intersecția unei traiectorii fazice cu S dă o succesiune de puncte, $A_0, A_1, \dots$. Aplicația Poincaré, notată $P: S \rightarrow S$ este definită prin [5]

$$\bar{x}_{k+1} = P(\bar{x}_k) \quad (6.15)$$

unde cu $\bar{x}_k$ am notat coordonatele punctului de secțiune A_k . Dacă sistemul descris de (6.14) admite o traiectorie închisă de tip ciclu limită, atunci intersecția acesteia cu planul S va fi un punct fix al aplicației P

$$\bar{x}^* = P(\bar{x}^*) \quad (6.16)$$

deoarece traiectoria fazică revine în punctul de secțiune după o perioadă. Prin analiza aplicației Poincaré, se poate determina stabilitatea ciclului limită. Punctul fix și ciclul limită corespunzător au aceleași proprietăți de stabilitate. Considerăm $\bar{\delta}_0$ o perturbație inițială a punctului fix, astfel încât

$$\bar{x} = \bar{x}^* + \bar{\delta}_0$$

este de asemenea în planul de secțiune S . După parcurgerea unei orbite, traiectoria perturbată va fi

$$\bar{x}^* + \bar{\delta}_1 = P(\bar{x}^* + \bar{\delta}_0) \quad (6.17)$$

Dezvoltăm membrul drept al ecuației (6.17) în serie Taylor și păstrăm doar termenul liniar, considerînd perturbațiile mici. Rezultă [5]

$$\bar{x}^* + \bar{\delta}_1 = P(\bar{x}^*) + DP(\bar{x}^*)\bar{\delta}_0 \quad (6.18)$$

unde $DP(\bar{x}^*)$ este o matrice $(n-1) \times (n-1)$, numită *aplicația Poincaré liniarizată*. Ținînd cont de condiția de punct fix (6.16), (6.18) devine

$$\bar{\delta}_1 = DP(\bar{x}^*)\bar{\delta}_0 \quad (6.19)$$

Orbita închisă este liniar stabilă dacă și numai dacă valorile proprii ale lui $DP(\bar{x}^*)$ au toate modulul subunitar,

$$|\lambda_j| < 1 \quad j = \overline{1, n-1} \quad (6.20)$$

Mărimile λ_j se numesc *multiplicatori caracteristici* sau *multiplicatori Floquet* ai orbitei periodice [5]. În general, aceștia nu pot fi evaluați decît numeric.

Aplicația 6.1

Considerăm un sistem descris de ecuațiile de evoluție [5]

$$\begin{cases} \dot{r} = r(1-r^2) \\ \dot{\theta} = 1 \end{cases} \quad (6.21)$$

Calculați aplicația Poincaré. Arătați că orbita periodică este stabilă. Găsiți multiplicatorii Floquet pentru ciclul limită.

Rezolvare

Considerăm condiția inițială r_0 în planul de secțiune S. Din ecuația de evoluție pentru unghi rezultă

$$\frac{d\theta}{dt} = 1 \Rightarrow \int_0^{2\pi} d\theta = \int_0^T dt \Rightarrow T = 2\pi$$

Din ecuația de evoluție pentru rază, rezultă

$$\frac{dr}{dt} = r(1-r^2) \Rightarrow \int_{r_0}^{r_1} \frac{dr}{r(1-r^2)} = 2\pi \quad (6.22)$$

unde r_1 va fi coordonata radială a punctului de secțiune după parcurgerea unui ciclu.

Pentru a evalua integrala din membrul stâng, scriem

$$\frac{1}{r(1-r^2)} = \frac{A}{r} + \frac{B}{1-r} + \frac{C}{1+r}$$

De aici rezultă că $A = 1$; $B = 1/2$; $C = -1/2$. Ecuației (6.22) devine

$$\int_{r_0}^{r_1} \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{2} \frac{1}{1-r} - \frac{1}{2} \frac{1}{1+r} \right) dr = 2\pi$$

de unde

$$\frac{1}{2} \ln \left| \frac{r^2}{r^2 - 1} \right| \Big|_{r_0}^{r_1} = 2\pi$$

De aici rezultă expresia aplicației Poincaré

$$r_1 = P(r_0) = \left[1 + e^{-4\pi} \left(\frac{1}{r_0^2} - 1 \right) \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (6.23)$$

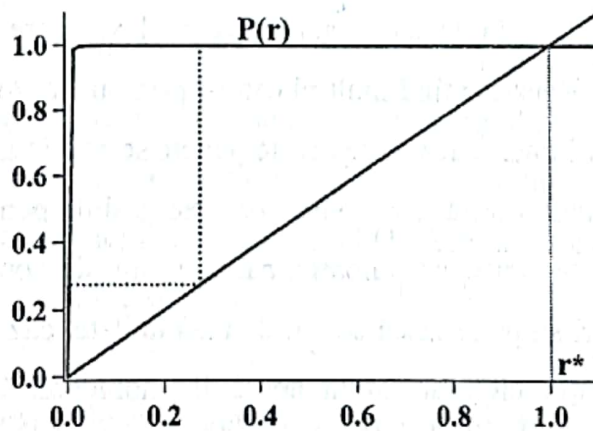


Fig. 6.6

Fig. 6.6 prezintă iterația corespunzătoare ecuației (6.23). Se observă convergența foarte rapidă către $r^* = 1$, care este punct fix stabil al aplicației Poincaré. Ca urmare, ecuațiile de evoluție (6.21) admit un ciclu limită stabil de amplitudine 1.

Căutăm multiplicatorul corespunzător ciclului limită. Punctul fix al aplicației Poincaré este $r^* = 1$. Traiectoria perturbată este

$$r = 1 + \delta \quad (6.24)$$

Înlocuind (6.24) în ecuația de evoluție pentru rază din (6.21), se obține

$$\dot{\delta} = (1 + \delta) \left[1 - (1 + \delta)^2 \right] \quad (6.25)$$

În aproximația liniară, ecuația de evoluție pentru perturbație este

$$\dot{\delta} = -2\delta \quad (6.26)$$

Perturbația depinde de timp după legea

$$\delta(t) = \delta_0 e^{-4\pi t}$$

După o perioadă, $\delta_1 = \delta_0 e^{-4\pi}$. Rezultă că $e^{-4\pi}$ este multiplicatorul Floquet al ciclului limită considerat. Deoarece $|e^{-4\pi}| < 1$, rezultă că ciclul limită este stabil. Același rezultat poate fi obținut calculând derivata aplicației Poincaré (6.23) în punctul fix, $r^* = 1$.

Mecanisme de pierdere a stabilității ciclului limită

Comportamentul periodic de tip ciclu limită poate să apară doar în sisteme autonome de ordin mai mare sau egal cu doi [3]. Dacă dimensiunea sistemului este cel puțin trei, atunci aplicația Poincaré liniarizată (6.19) admite cel puțin doi multiplicatori caracteristici și aceștia sînt în general, numere complexe, care depind de valorile parametrilor de control. Reprezentînd multiplicatorii prin puncte în planul complex, în acord cu criteriul de stabilitate, dacă toate aceste puncte se află în interiorul cercului de rază unitate, atunci ciclul limită corespunzător este stabil, pentru acea valoare a parametrului de control. Modificînd valoarea parametrului de control, este posibil ca unul dintre multiplicatori să părăsească cercul de rază unitate, caz în care ciclul limită devine instabil. Bifurcația ciclului limită apare în momentul în care unul dintre multiplicatori intersectează cercul de rază unitate. În funcție de modul în care este intersectat cercul de rază unitate de către multiplicatori, în punctul de bifurcație, apar următoarele situații [11]:

- a) În punctul de bifurcație, un multiplicator intersectează cercul unitate în unu (fig. 6.7 a),

$$\lambda(a_0) = 1 \quad (6.27)$$

unde a_0 este valoarea parametrului de control a în punctul de bifurcație. De obicei, în acest caz sînt generate sau dispar cicluri limită, prin bifurcații furcă sau transcritice ale ciclului limită.

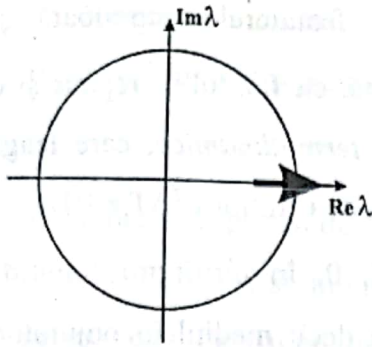


Fig. 6.7 a

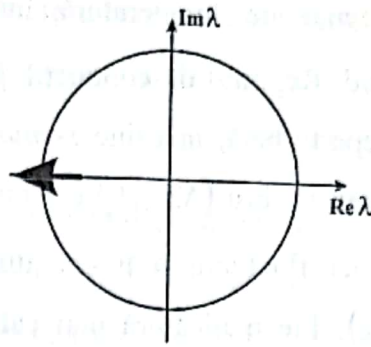


Fig. 6.7 b

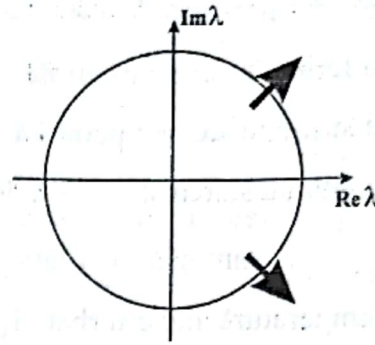


Fig. 6.7 c

b) În punctul de bifurcație, un multiplicator intersectează cercul unitate în minus unu (fig. 6.7 b),

$$\lambda(a_0) = 1 \quad (6.28)$$

Ciclul limită suferă o bifurcație cu dublare de perioadă, numită și bifurcație subarmonică. De obicei, aceste bifurcații apar în cascadă

$$P \rightarrow P2 \rightarrow P4 \rightarrow \dots$$

c) În punctul de bifurcație, doi multiplicatori intersectează cercul unitate avînd o parte imaginară nenulă (fig. 6.7 c)

$$\lambda_{1,2}(a_0) = \alpha \pm i\beta \quad (6.29)$$

Dincolo de punctul de bifurcație, atractorul este un tor și dinamica este cuasiperiodică. Bifurcația se mai numește și bifurcație Hopf a ciclului limită, bifurcație Hopf secundară sau bifurcație Hopf generalizată [11]. Aceasta apare în scenariul Ruelle-Takens-Newhouse de tranziție spre haos.

6.4. Metoda Galerkin de reducere a unui sistem de ecuații diferențiale cu derivate parțiale la un sistem de ecuații diferențiale ordinare. Modelul Lorenz

Considerăm experimentul Bénard: o pătură de fluid este încălzită de dedesubt, între două plăci bune conductoare termic, aflate la temperaturi constante. Pătura de fluid prezintă o stratificare a densității potențial instabilă în câmp gravitațional: fluidul dens este deasupra celui mai puțin dens. Presupunem că în starea de bază stratul de fluid de înălțime d este supus unui gradient de temperatură

$$\beta = \frac{T_1 - T_0}{d} < 0$$

$\Delta T = T_1 - T_0 < 0$ este diferența de temperatură între frontierele superioară și inferioară ale stratului de fluid. Regimul de conducție pură, cu fluidul în repaus și o distribuție de temperatură neperturbată, aparține *ramurii termodinamice*, care leagă continuu starea staționară de neechilibru ($\Delta T \neq 0$) de starea de echilibru ($\Delta T = 0$).

Examinăm evoluția unei fluctuații a temperaturii, θ , în jurul profilului de temperatură neperturbat $T_0(z)$. Fie o picătură mai caldă decât mediul înconjurător, $\theta > 0$. Densitatea scade cu temperatura, deci picătura este mai ușoară decât vecinătatea ei, tinzând să urce. Lichidul fiind încălzit de jos, densitatea crește cu altitudinea și picătura întâlnește un fluid din ce în ce mai rece, tinzând să urce din ce în ce mai rapid. Fluctuația inițială este amplificată. Două procese disipative tind să mențină fluidul în repaus:

- frecarea (amortizarea mișcării prin vîscozitate);
- conducția termică, care micșorează diferența de temperatură dintre picătură și mediu, deci diminuează forța ascensională.

Instabilitatea nu se poate dezvolta decât dacă picătura este accelerată suficient de mult pentru a depăși efectul acestor procese disipative. Gradientul de temperatură β , care reprezintă parametrul de control al acestei instabilități, trebuie să depășească valoarea critică β_C . Deasupra pragului critic, apare o structură organizată de celule de convecție.

Pentru un fluid unicomponent, ecuațiile de bilanț a masei, impulsului și energiei interne sînt [15,17]

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \\ \frac{\partial (\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{P} + \rho \vec{v} \vec{v}) = \rho \vec{g} \\ \frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \vec{v} + \vec{j}_q) = -\vec{P} : (\nabla \vec{v}) \end{cases} \quad (6.30)$$

ρ reprezintă densitatea masică a fluidului, $\vec{v}$ este viteza acestuia, $\vec{g}$ este accelerația gravitațională, u este energia internă a unității de volum, iar $\vec{j}_q$ reprezintă fluxul de căldură. Cu $\vec{P}$ am notat tensorul presiunilor. Cu $:$ s-a notat produsul a doi tensori,

$$\vec{A} : \vec{B} = A_{ij} B_{ji}$$

cu convenția indicelui mut de sumare a lui Einstein (sumare după indicii care se repetă). Tensorul presiunilor poate fi scris

$$\vec{P} = \vec{P}^e + \vec{P}^v \quad (6.31)$$

$\vec{P}^e$ reprezintă partea de echilibru și depinde de starea sistemului. $\vec{P}^v$ reprezintă partea de neechilibru și se numește tensorul tensiunilor vîscoase. La echilibru, această parte se anulează. Pentru un mediu izotrop în repaus,

$$\vec{P}^e = \begin{pmatrix} p & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & p \end{pmatrix} = p\vec{I} \quad (6.32)$$

unde p este presiunea hidrostatică. În cazul sistemelor vîscoase la neechilibru, tensorul tensiunilor vîscoase este nenul. În acord cu (6.31) și (6.32), tensorul presiunilor va fi, pentru sisteme vîscoase omogene și izotrope, la neechilibru

$$\vec{P} = p\vec{I} + \vec{P}^v \quad (6.33)$$

Se fac următoarele ipoteze:

- a. Fluidul este presupus newtonian; ca urmare, tensorul presiunilor este dat de (6.33), unde tensorul tensiunilor vîscoase este

$$P_{\alpha\beta}^v = -\xi(\nabla \cdot \vec{v})\delta_{\alpha\beta} - \eta \left[\frac{\partial v_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial v_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \vec{v})\delta_{\alpha\beta} \right] \quad (6.34)$$

unde ξ este vîscozitatea volumică, iar η este vîscozitatea tangențială (de forfecare).

- b. Conducția termică este descrisă de ecuația Fourier

$$\vec{j}_q = -\lambda \nabla T \quad (6.35)$$

- c. Expansiunea termică este liniară

$$\rho = \rho_0 [1 - \alpha(T - T_0)] \quad (6.36)$$

unde α este constanta de dilatare termică.

- d. Admitem că fluidul satisface ecuația calorică de stare. Ca urmare, energia sa internă este

$$u = c_p T \quad (6.37)$$

unde c_p este capacitatea calorică a unității de volum a fluidului, la presiune constantă.

e. În majoritatea lichidelor, dilatarea termică este mică. Considerăm peste tot densitatea constantă, notată ρ_0 , cu excepția ecuației de bilanț a impulsului.

Cu aceste aproximații, sistemul (6.30) conduce la sistemul de ecuații Boussinesq [4,17]

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \vec{v} &= 0 \\ \rho_0 \left[\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} \right] + \nabla p &= (\rho_0 + \delta \rho) \vec{g} + \eta \Delta \vec{v} \\ \frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) T &= \frac{\lambda}{\rho_0 c_p} \Delta T\end{aligned}\quad (6.38)$$

unde ρ este densitatea perturbată

$$\rho = \rho_0 + \delta \rho \quad (6.39)$$

Prima dintre ecuațiile (6.38) reprezintă condiția ca fluidul să fie incompresibil.

Apariția convecției în stratul de fluid se produce când forța ascensională, care rezultă din dilatarea termică, depășește forțele vâscoase. Se definește numărul Rayleigh

$$R = \frac{|\vec{F}_{\text{asc}}|}{|\vec{F}_{\text{visc}}|} \approx \frac{\left| \frac{\delta \rho \vec{g}}{\rho_0} \right|}{\left| \frac{\eta \Delta \vec{v}}{\rho_0} \right|} \quad (6.40)$$

Perturbația densității satisface, în acord cu ecuația (6.36)

$$\frac{\delta \rho}{\rho_0} \approx \alpha \Delta T \quad (6.41)$$

Pe de altă parte, din ecuația de bilanț a energiei interne (ultima dintre ecuațiile (6.38)), rezultă că

$$v \approx \frac{\lambda}{\rho_0 c_p} \frac{1}{d} \quad (6.42)$$

Înlocuind (6.41) și (6.42) în (6.40), se obține pentru numărul Rayleigh

$$R = \frac{\alpha \beta \rho_0 c_p g}{v \lambda} d^4 \quad (6.43)$$

unde $\nu = \frac{\eta}{\rho_0}$ este vîscozitatea cinematică. În cazul convecției Bénard, numărul lui

Rayleigh joacă rolul parametrului de control. Convecția se produce pentru

$$R > R_{\text{Critie}}$$

De cele mai multe ori, R este controlat prin gradientul de temperatură β .

Alegem drept stare de referință starea staționară de repaus ($\vec{v}_S = 0$), pentru care ultimele două ecuații din sistemul (6.38) se reduc la

$$\begin{cases} \nabla p_S = -\rho_S g \hat{z} = -\rho_0 [1 - \alpha(T_S - T_0)] g \hat{z} \\ \Delta T_S = 0 \end{cases} \quad (6.44)$$

unde $\hat{z}$ reprezintă versorul direcției verticale. Considerăm că presiunea și temperatura variază numai în direcție verticală, datorită geometriei experimentului. Pentru temperatură, condițiile la frontieră sînt

$$T(x, y, 0) = T_0; \quad T(x, y, d) = T_1$$

Integrînd a doua ecuație (6.44) cu aceste condiții la frontieră, rezultă că, în starea de referință de repaus, profilul temperaturii în direcție verticală este liniar

$$T_S = T_0 - \beta z \quad (6.45)$$

unde β este gradientul de temperatură. Înlocuind (6.45) în prima ecuație (6.44) și integrînd, rezultă

$$p_S(z) = p_0 - \rho_0 g \left(1 + \frac{\alpha \beta z}{2} \right) z \quad (6.46)$$

Caracteristicile sistemului în această stare sînt independente de coeficienții cinetici η și λ care apar în ecuațiile de bilanț. Studiem stabilitatea stării de referință prin metoda micilor perturbații. Starea perturbată este caracterizată de

$$\begin{cases} T = T_S(z) + \theta(\vec{r}, t) \\ \rho = \rho_S(z) + \delta\rho(\vec{r}, t) \\ p = p_S(z) + \delta p(\vec{r}, t) \\ \vec{v} = \delta\vec{v}(\vec{r}, t) = (u, v, w) \end{cases} \quad (6.47)$$

După cum se observă din (6.47), perturbațiile sînt funcții de poziție și de timp. Înlocuind (6.47) în ecuațiile de evoluție ale aproximației Boussinesq (6.38) și ținînd cont de (6.45) și (6.46), se obțin, în aproximația liniară, următoarele ecuații pentru perturbații:

$$\nabla \cdot \delta\vec{v} = 0$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \beta w + \kappa \nabla^2 \theta \quad (6.48)$$

$$\frac{\partial \delta \vec{v}}{\partial t} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla \delta p + \nu \nabla^2 \delta \vec{v} + g \alpha \theta \hat{z}$$

unde $\kappa = \frac{\lambda}{\rho_0 c_p}$ este difuzivitatea termică. Trecem la variabile adimensionale în

sistemul (6.48), cu ajutorul transformărilor: $\vec{r}' = \frac{\vec{r}}{d}$; $t' = \frac{t}{d^2/\kappa}$; $\theta' = \frac{\theta}{\left(\frac{\nu \kappa}{g \alpha d^3}\right)}$;

$\delta \vec{v}' = \frac{\delta \vec{v}}{\kappa/d}$ și $\delta p' = \frac{\delta p}{\left(\frac{\rho_0 \nu \kappa}{d^2}\right)}$. În aceste transformări, fiecare mărime este raportată la

mărimea caracteristică corespunzătoare. Înlocuim aceste transformări și renunțăm, pentru simplitate, la prim. Perturbațiile adimensionale satisfac ecuațiile

$$P^{-1} \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} \right) = -\nabla p + \theta \hat{z} + \nabla^2 \vec{v}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \theta = R w + \nabla^2 \theta \quad (6.49)$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0$$

unde $P = \nu/\kappa$ este numărul Prandtl, iar R este numărul Rayleigh.

Dincolo de pragul de instabilitate ($R > R_C$), starea de referință devine instabilă, cu apariția rulourilor de convecție. Considerăm că acestea sînt paralele, deci vectorul viteză va fi întotdeauna perpendicular pe axa acestora. Presupunem rulourile paralele cu axa y ; ca urmare, componenta vitezei pe această direcție este nulă. Condiția de incompresibilitate devine

$$u_x + w_z = 0 \quad (6.50)$$

Ecuația (6.50) este satisfăcută dacă

$$u = -\psi_z; \quad w = \psi_x \quad (6.51)$$

unde $\psi(x, y, z)$ se numește funcția de curent a lui Lagrange. Cîmpul de viteze trebuie să satisfacă condițiile impuse pe suprafețele inferioară și superioară

$$w|_{z=\pm 1/2} = 0 \quad (6.52)$$

Dacă suprafețele sînt considerate libere (sînt ignorate forțele de tensiune superficială), componenta de forfecare a tensorului presiunilor se anulează

$$-\eta \frac{\partial \eta}{\partial z} \Big|_{z=\pm 1/2} = 0 \Rightarrow \frac{\partial u}{\partial z} \Big|_{z=\pm 1/2} = 0 \quad (6.53)$$

Utilizînd funcția Lagrange, condițiile la limită (6.52) și (6.53) devin

$$\begin{cases} \psi_x|_{z=\pm 1/2} = 0 \\ \psi_{zz}|_{z=\pm 1/2} = 0 \end{cases}$$

Considerăm ψ de forma

$$\psi(x, z, t) = \psi_1(t) \cos(\pi z) \sin(qx)$$

Conform (6.51), componentele cîmpului de viteze sînt

$$\begin{cases} u = \pi \psi_1(t) \sin(\pi z) \sin(qx) \\ w = q \psi_1(t) \cos(\pi z) \cos(qx) \end{cases}$$

Ecuția de conservare a impulsului (prima ecuație (6.49)) pentru direcțiile x și z devine

$$\begin{cases} P^{-1}(u_t + uu_x + wu_z) = -p_x + \Delta u \\ P^{-1}(w_t + uw_x + ww_z) = -p_z + \Delta w + \theta \end{cases} \quad (6.54)$$

Derivăm prima ecuație (6.54) în raport cu z și a doua în raport cu x . Rezultă

$$\begin{cases} P^{-1} \left[u_{tz} + \frac{\partial}{\partial z} (uu_x + wu_z) \right] = -p_{xz} + \frac{\partial}{\partial z} (\Delta u) \\ P^{-1} \left[w_{tx} + \frac{\partial}{\partial x} (uw_x + ww_z) \right] = -p_{zx} + \frac{\partial}{\partial x} (\Delta w) + \frac{\partial \theta}{\partial x} \end{cases}$$

Adunînd aceste ecuații se obține

$$P^{-1} \left[-(\Delta \psi)_t + \frac{\partial}{\partial z} (uu_x + wu_z) - \frac{\partial}{\partial x} (uw_x + ww_z) \right] = -\Delta^2 \psi - \theta_x \quad (6.55)$$

Temperatura fiind fixată pe cele două frontiere, avem

$$\theta|_{z=\pm 1/2} = 0$$

Considerăm θ de forma

$$\theta(x, z, t) = \theta_1(t) \cos(\pi z) \cos(qx) + \theta_2(t) \sin(2\pi z) \quad (6.56)$$

Înlocuind în (6.55) expresiile pentru u, w, θ și ψ , rezultă

$$P^{-1}\dot{\psi}_1 = \frac{q\theta_1}{\pi^2 + q^2} - (\pi^2 + q^2)\psi_1 \quad (6.57)$$

Ecuatia de bilanț al energiei interne devine

$$\begin{cases} \dot{\theta}_1 = -\pi q \psi_1 \theta_2 + q R \psi_1 - (\pi^2 + q^2)\theta_1 \\ \dot{\theta}_2 = \frac{1}{2} \pi q \psi_1 \theta_1 - 4\pi^2 \theta_2 \end{cases} \quad (6.58)$$

În ecuațiile de evoluție pentru amplitudini, (6.57) și (6.58), facem schimbarea de variabile

$$\begin{cases} t' = (\pi^2 + q^2)t; X = \frac{\pi q}{\sqrt{2}(\pi^2 + q^2)}\psi_1 \\ Y = \frac{\pi q^2}{\sqrt{2}(\pi^2 + q^2)^3}\theta_1; Z = \frac{\pi q^2}{(\pi^2 + q^2)^3}\theta_2 \end{cases}$$

Se obține astfel sistemul ecuațiilor de evoluție

$$\begin{cases} \dot{X} = P(Y - X) \\ \dot{Y} = -XZ + rX - Y \\ \dot{Z} = XY - bZ \end{cases} \quad (6.59)$$

unde $r = \frac{q^2}{(\pi^2 + q^2)^3}R$ și $b = \frac{4\pi^2}{\pi^2 + q^2}$. (6.59) se numește sistemul Lorenz.

6.5. Proprietăți ale sistemului Lorenz. Tranziții spre haos.

Considerăm ecuațiile de evoluție ale sistemului Lorenz, (6.59), cu notația

$$\begin{cases} \dot{x} = \sigma(y - x) \\ \dot{y} = rx - y - xz \\ \dot{z} = xy - bz \end{cases} \quad (6.60)$$

Acest sistem este disipativ, în acord cu (2.25)

$$\nabla \cdot \vec{F} = -\sigma - 1 - b < 0$$

Ca urmare, volumul fazic scade exponențial în timp, pe măsură ce sistemul tinde către atractor. Pentru orice valoare a parametrului de control r , sistemul (6.60) admite ca punct fix originea,

$$x_0 = y_0 = z_0 = 0 \quad (6.61)$$

Ecuația caracteristică este

$$\begin{vmatrix} -\sigma - \omega & \sigma & 0 \\ r - z_0 & -1 - \omega & -x_0 \\ y_0 & x_0 & -b - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (6.62)$$

Pentru punctul fix (6.61), aceasta devine

$$\begin{vmatrix} -\sigma - \omega & \sigma & 0 \\ r & -1 - \omega & 0 \\ 0 & 0 & -b - \omega \end{vmatrix} = 0$$

de unde rezultă

$$(b + \omega)[\omega^2 + (1 + \sigma)\omega - \sigma(r - 1)] = 0 \quad (6.63)$$

Deoarece parametrii b , r și σ sînt întotdeauna pozitivi, rezultă că prima valoare proprie, $\omega_1 = -b$, este negativă pentru orice valori ale parametrilor. Celelalte două valori proprii satisfac

$$\begin{cases} \omega_2 + \omega_3 = -(1 + \sigma) < 0 \\ \omega_2 \omega_3 = -\sigma(r - 1) \end{cases} \quad (6.64)$$

În acord cu (6.64), dacă parametrul de control $0 < r < 1$, suma celor două valori proprii este negativă și produsul este pozitiv. Ca urmare, toate valorile proprii sînt negative, iar originea este un nod stabil. Pentru $r > 1$, în acord cu (6.64), originea devine instabilă, cu apariția, într-o bifurcație furcă, a două noi puncte fixe stabile, notate C^+ și C^- , care corespund rulourilor de convecție ce apar în experimentul Bénard

$$\begin{pmatrix} C^+ \\ C^- \end{pmatrix} \begin{cases} x_0 = y_0 = \sqrt{b(r-1)} \\ z_0 = r-1 \end{cases}; \begin{pmatrix} C^- \\ C^+ \end{pmatrix} \begin{cases} x_0 = y_0 = -\sqrt{b(r-1)} \\ z_0 = r-1 \end{cases} \quad (6.65)$$

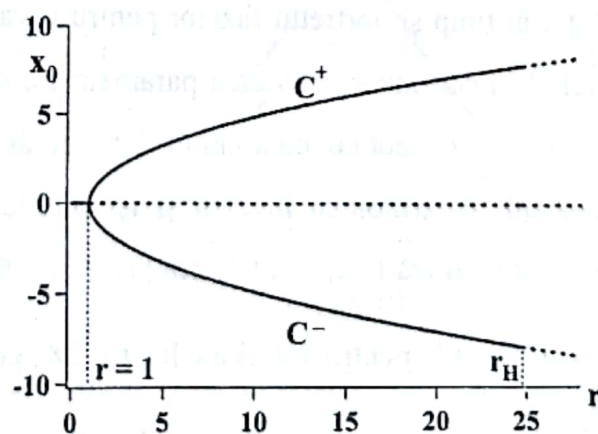


Fig. 6.8

Studiem stabilitatea acestora. Înlocuind valorile corespunzătoare ramurii (C^+) în (6.62), ecuația caracteristică devine

$$\begin{vmatrix} -\sigma - \omega & \sigma & 0 \\ 1 & -1 - \omega & -\sqrt{b(r-1)} \\ \sqrt{b(r-1)} & \sqrt{b(r-1)} & -b - \omega \end{vmatrix} = 0$$

de unde rezultă că

$$\omega^3 + \omega^2(b + \sigma + 1) + \omega b(\sigma + r) + 2b\sigma(r - 1) = 0 \quad (6.66)$$

Dacă punctele fixe (6.65) vor suferi, pentru o valoare a parametrului de control $r_H > 1$, o bifurcație Hopf, în punctul de bifurcație vor exista două valori proprii pur imaginare complex conjugate. Înlocuind $\omega = i\beta$ în (6.66), se obține

$$-i\beta^3 - \beta^2(b + \sigma + 1) + i\beta b(\sigma + r) + 2b\sigma(r - 1) = 0 \quad (6.67)$$

Separînd părțile reală și imaginară în (6.67), se obține sistemul

$$\begin{cases} -\beta^3 + \beta b(\sigma + r) = 0 \\ -\beta^2(b + \sigma + 1) + 2b\sigma(r - 1) = 0 \end{cases} \quad (6.68)$$

Din prima ecuație (6.68), rezultă că $\beta^2 = b(\sigma + r)$. Înlocuind această valoare în cea de-a doua ecuație (6.68), se obține că bifurcația Hopf are loc în

$$r_H = \sigma \frac{b + \sigma + 3}{\sigma - b - 1} \quad (6.69)$$

Pentru această valoare a parametrului de control, cele două puncte fixe, C^+ și C^- , își pierd stabilitatea într-o bifurcație Hopf subcritică [5]. Dincolo de punctul de bifurcație, toate orbitele periodice sînt instabile și sistemul prezintă un comportament haotic. Fig. 6.9 a și b prezintă evoluția în timp și portretul fazelor pentru o valoare a parametrului de control $r = 28$. Crescînd în continuare valoarea parametrului de control r , există o succesiune complicată de regimuri haotice, cu anumite ferestre de periodicitate. Ciclul limită apare printr-o cascadă subarmonică inversă și își pierde stabilitatea printr-o tranziție prin intermitențe spre o nouă fereastră haotică [15]. Fig. 6.8 prezintă aspectele esențiale ale diagramei de bifurcație pentru valori ale lui $r \leq 28$, cu $\sigma = 10$ și $b = \frac{8}{3}$.

Înlocuind aceste valori în (6.69), se obține că bifurcația Hopf subcritică are loc pentru

$r_H \approx 24,74$. Fig. 6.10 prezintă aplicația primului retur (numită și aplicația Lorenz) pentru comportamentul haotic din fig. 6.9.

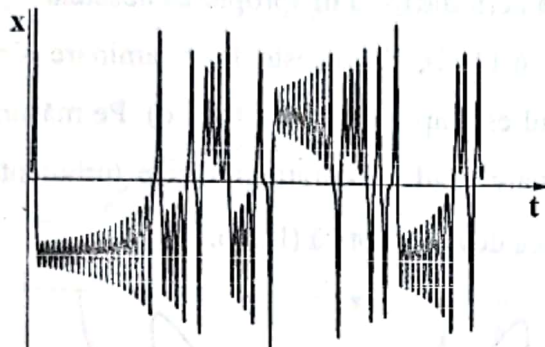


Fig. 6.9 a

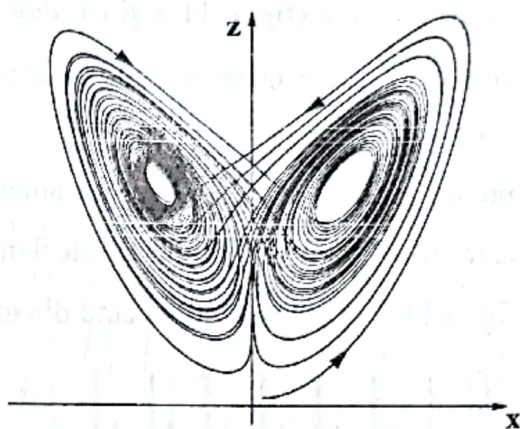


Fig. 6.9 b

Din seria temporală $z(t)$, s-au obținut maximele locale, notate $z_0, z_1, \dots$. Pentru a obține aplicația Lorenz, se reprezintă maximul de ordin $k+1$ în funcție de maximul anterior, z_k . În cazul unui comportament periodic de perioadă unu, această aplicație ar prezenta un singur punct, aflat pe diagonala principală. În ciuda complexității ridicate a evoluției temporale (fig. 6.9 a), aplicația primului retur are un aspect foarte simplu, asemănător aplicației cortului (cap. 5); cunoscând valoarea z_k , poate fi prezisă valoarea maximului următor,

$$z_{k+1} = f(z_k) \quad (6.70)$$

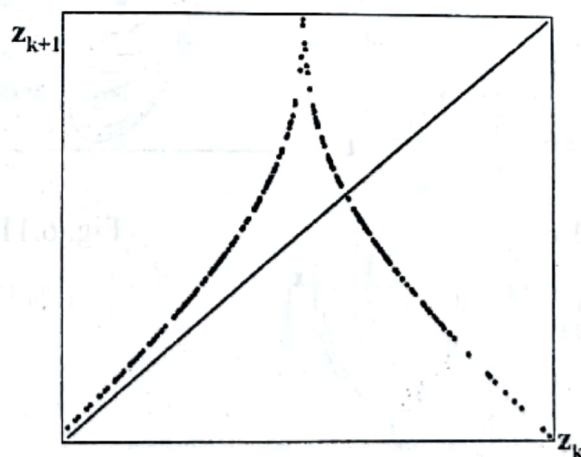


Fig. 6.10

Deoarece graficul din fig. 6.10 are peste tot pantă supraunitară în modul, $|f'(z)| > 1$, rezultă că orice ciclu limită și orice orbită închisă sînt instabile.

Intermitențe în modelul Lorenz

Pentru o valoare a parametrului de control $r = 166$, comportamentul sistemului Lorenz este periodic (fig. 6.11 a și b). Pentru $r = 166,1$ dinamica devine intermitentă: sistemul petrece majoritatea timpului pe orbita periodică sau în apropierea acesteia, așa cum se observă și în portretul fazelor (fig. 6.11 d), dar aceste faze laminare sînt întrerupte de momente în care comportamentul este aperiodic (fig. 6.11 c). Pe măsură ce parametrul de control crește, fazele laminare scad ca durată și fazele turbulente cresc (fig. 6.11 e, $r = 166,5$), pînă cînd dinamica devine haotică (fig. 6.11 f, $r = 167$).

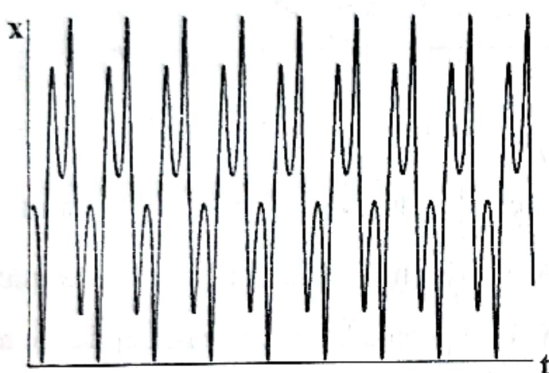


Fig. 6.11 a

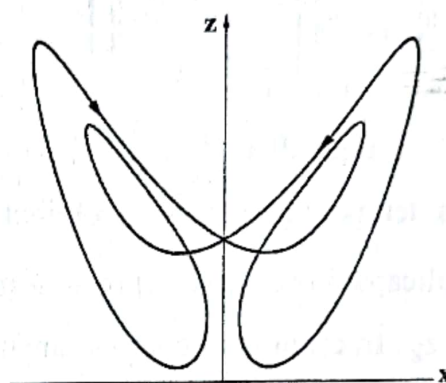


Fig. 6.11 b

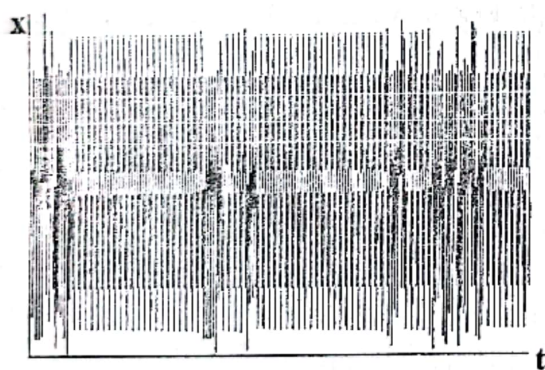


Fig. 6.11 c

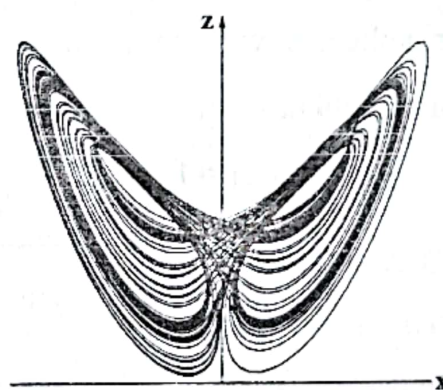


Fig. 6.11 d

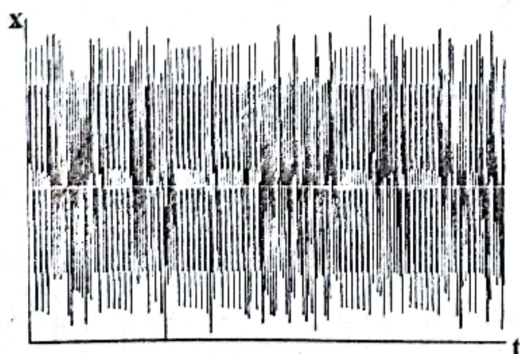


Fig. 6.11 e

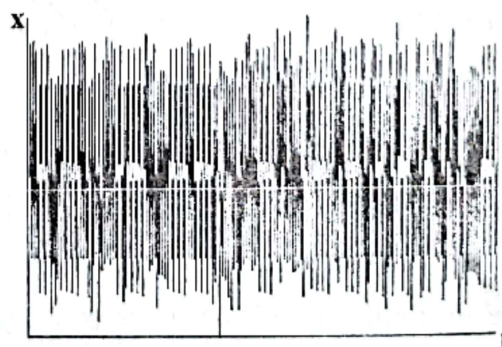


Fig. 6.11 f

6.6. Sistemul Rössler. Cascada bifurcațiilor subarmonice

Considerăm sistemul Rössler {Alli}

$$\begin{cases} \dot{x} = -y - z \\ \dot{y} = x + ay \\ \dot{z} = b + (x - c)z \end{cases} \quad (6.71)$$

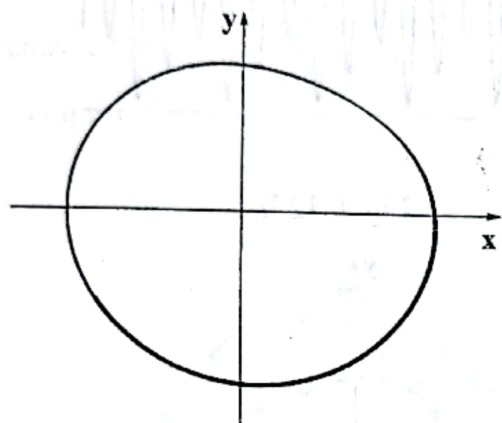


Fig. 6.12 a

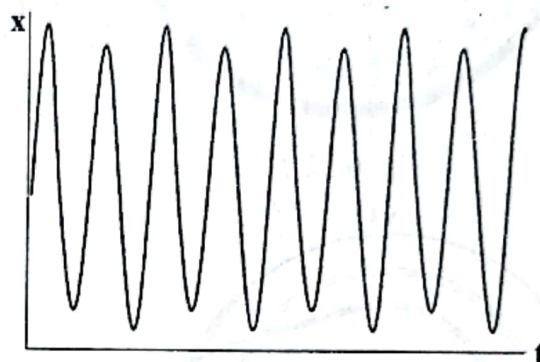


Fig. 6.12 b

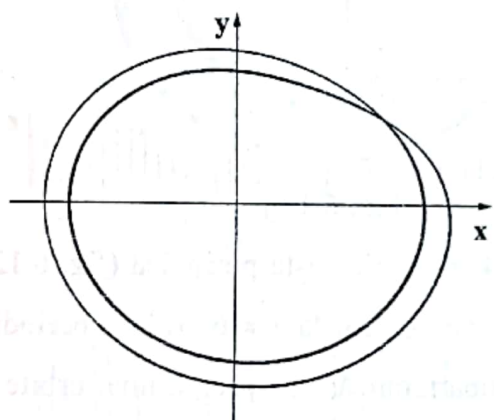


Fig. 6.12 c

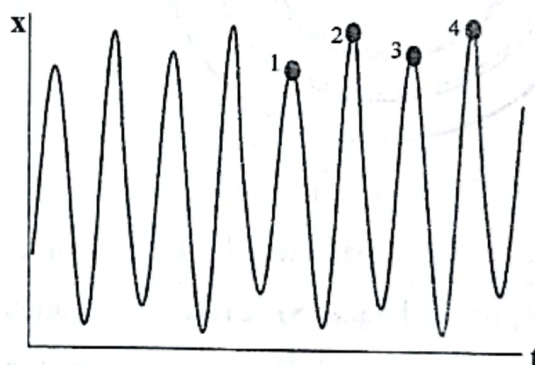


Fig. 6.12 d

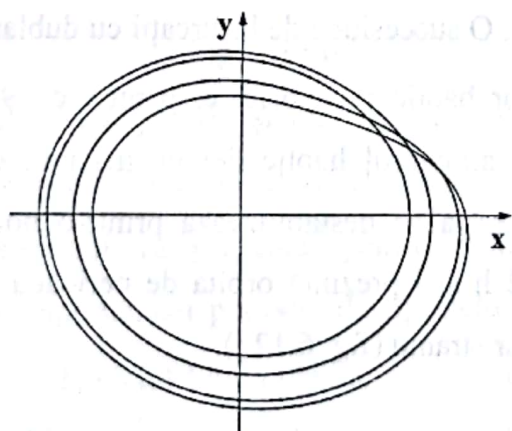


Fig. 6.12 e

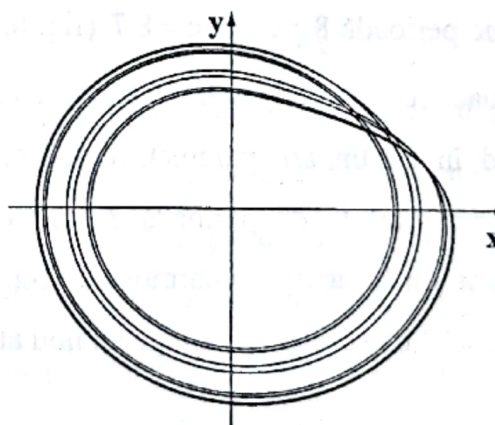


Fig. 6.12 f

Pentru parametrii a și b se iau valorile $a = 0,1$, $b = 0,1$, iar c joacă rolul de parametru de control. La creșterea acestuia, are loc o succesiune de bifurcații cu dublare de

perioadă (bifurcații subarmonice) [10].

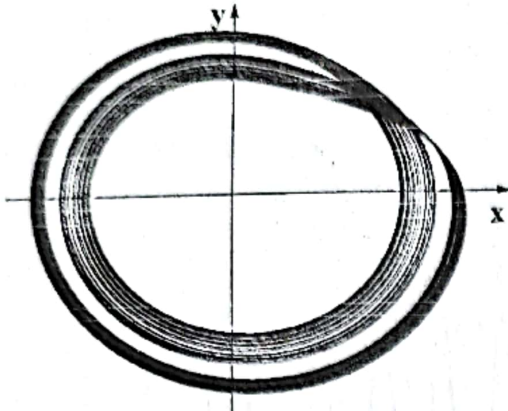


Fig. 6.12 g

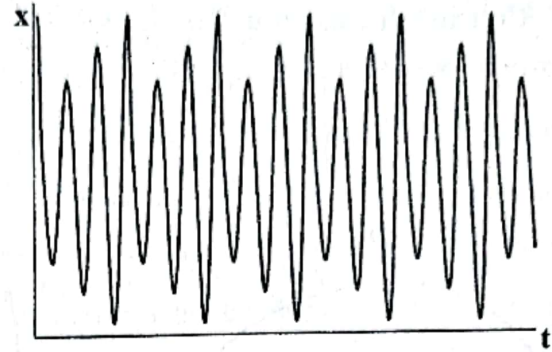


Fig. 6.12 h

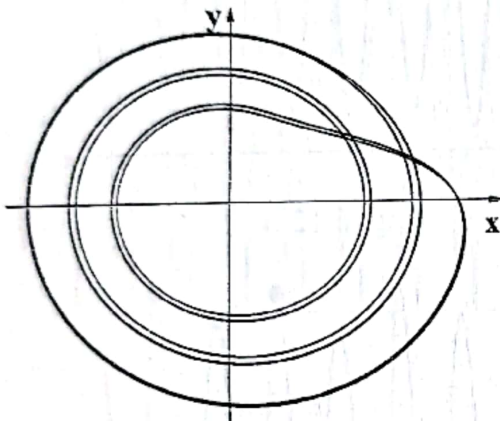


Fig. 6.12 i

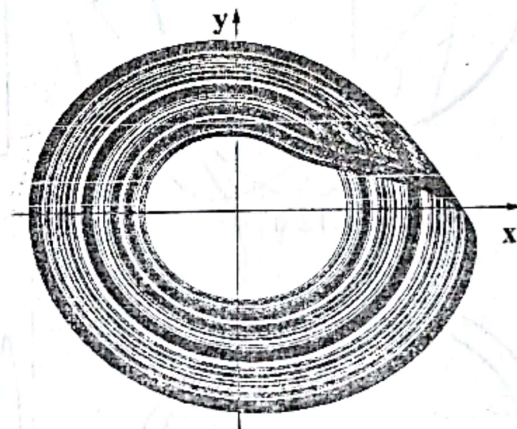


Fig. 6.12 j

Pentru o valoare a parametrului de control $c = 4$, dinamica este periodică (fig. 6.12 a prezintă portretul fazelor). Crescând parametrul de control la $c = 6$, orbita periodică anterioară devine instabilă, printr-o bifurcație subarmonică, cu apariția unei orbite de perioadă 2 (fig. 6.12 b și c). Pentru $c = 8,5$, orbita stabilă este de perioadă 4 (fig. 6.12 d și e) și de perioadă 8 pentru $c = 8,7$ (fig. 6.12 f). O succesiune de bifurcații cu dublare de perioadă conduce sistemul către un atractor haotic (fig. 6.12 g, pentru $c = 9$). Crescând în continuare parametrul de control, atractorul haotic devine instabil, cu apariția unei orbite de perioadă 3 stabile. Aceasta se destabilizează printr-o nouă succesiune de bifurcații subarmonice (fig. 6.12 h și i prezintă orbita de perioadă 6, pentru $c = 12,8$) și sistemul atinge un nou atractor straniu (fig. 6.12 j).

6.7. Scenariul Ruelle-Takens

Considerăm sistemul ecuațiilor de evoluție [12]

$$\begin{cases} \dot{x} = (\lambda - b)x - cy + x[z + d(1 - z^2)] \\ \dot{y} = cx + (\lambda - b)y + y[z + d(1 - z^2)] \\ \dot{z} = \lambda z - (x^2 + y^2 + z^2) \end{cases} \quad (6.72)$$

Pentru constante, se iau valorile: $b = 3$, $c = 0,25$ și $d = 0,2$. λ joacă rolul de parametru de control.

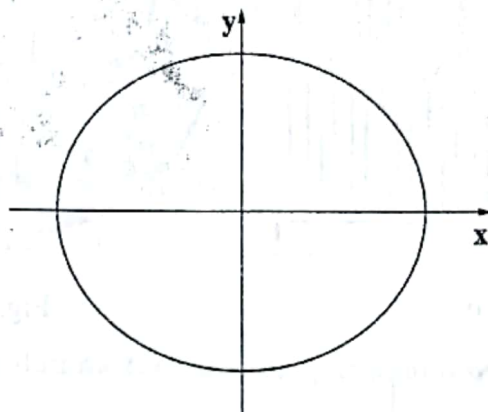


Fig. 6.13 a

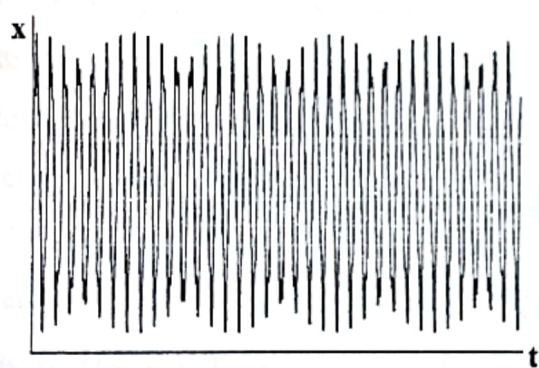


Fig. 6.13 b

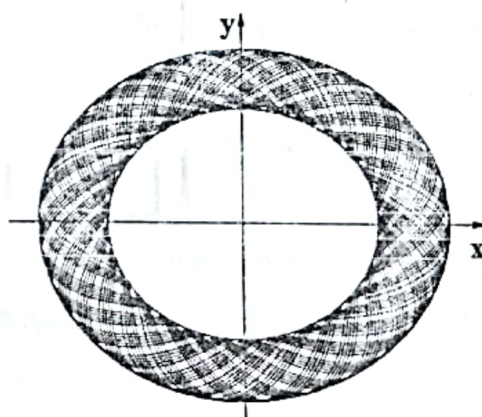


Fig. 6.13 c

Pentru λ pozitiv și mic, există o stare staționară stabilă pentru sistemul (6.72). În $\lambda \approx 1,68$, această stare staționară își pierde stabilitatea într-o bifurcație Hopf și sistemul va prezenta, pentru valori mai mari ale parametrului de control, un comportament periodic de tip ciclu limită (fig. 6.13 a, pentru $\lambda = 1,95$) [12]. Pentru $\lambda > 2$, ciclul limită devine instabil, cu apariția unui comportament cuasiperiodic. Fig. 6.13 b și c corespund unui punct situat imediat după bifurcația Hopf a ciclului limită, $\lambda = 2,005$. Atractorul nou apărut este un tor. Crescând în continuare valoarea parametrului de control, evoluția temporală devine mai neregulată, dar rămâne

cuasiperiodică (fig. 6.13 d și e, pentru $\lambda = 2,024$). În fig. 6.13 f este prezentat spectrul Fourier corespunzător evoluției temporale din fig. 6.13 c. În ciuda complexității evoluției temporale, spectrul este foarte simplu, cu cele două frecvențe fundamentale și câteva armonici superioare.

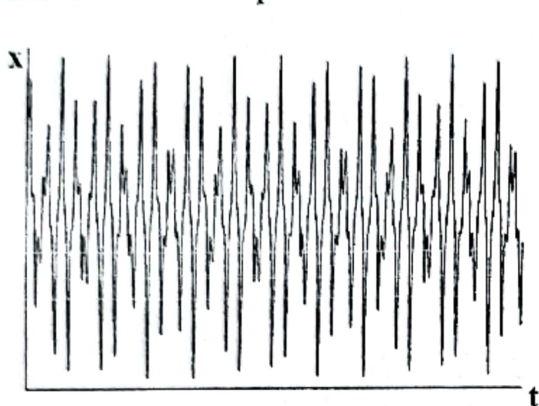


Fig. 6.13 d

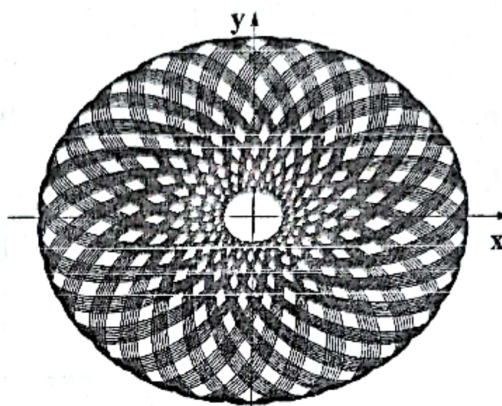


Fig. 6.13 e

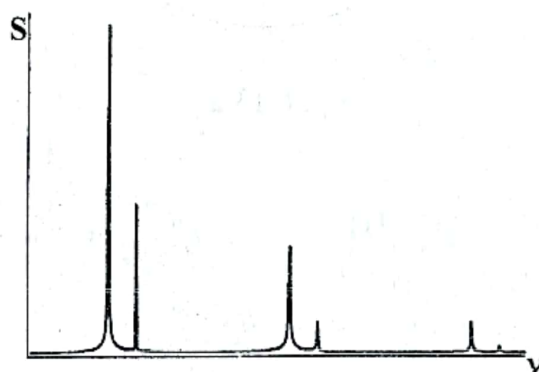


Fig. 6.13 f

6.8. Haos spațiotemporal

Multe sisteme extinse spațial pot suferi o succesiune de tranziții ce conduc la regimuri ce prezintă aperiodicitate atât în spațiu cât și în timp. Un regim cu această proprietate se numește *haos spațiotemporal*. Sistemele cu reacție-difuzie pot genera haos spațiotemporal [3].

Haosul temporal diferă de alte forme de comportament nestaționar prin coexistența unui număr mare de scale de timp ce interacționează. Haosul spațiotemporal implică în plus un număr mare de scale spațiale ce interacționează. Sistemele extinse spațial posedă un număr infinit de variabile. În anumite cazuri, poate fi realizată trunchierea la un număr finit și mic de variabile (vezi paragraful 6.4). Din

definiția haosului spațiotemporal pe care am prezentat-o mai sus, rezultă că în acest caz trunchierea nu mai este posibilă. În sistem apare o complexitate suplimentară, datorată prezenței unui număr infinit de grade de libertate.

A. Anumite scenarii conducând la haos spațiotemporal

În sisteme cu extindere spațială mare, mărimea L (dimensiunea caracteristică a sistemului) devine parametru de control. Crescând L de la valori mici, păstrând fixați ceilalți parametri de control, poate fi atins pragul unei prime instabilități. Crescând în continuare L , numărul de moduri instabile crește și sînt depășite noi praguri de instabilitate.

Cînd este variat în plus un al doilea parametru de control, diferite praguri de instabilitate pot fi atinse. Cu cît L este mai mare, cu atît aceste praguri de instabilitate sînt mai apropiate între ele.

B. Atraktorul sistemelor ce dau naștere la haos spațiotemporal

Cînd sistemul se află în vecinătatea unei tranziții la o structură spațială regulată (de exemplu instabilitate Turing sau Rayleigh-Bénard), putem utiliza o reducere drastică a dimensiunii sistemului dinamic, utilizînd metoda Galerkin. Variabilele relevante satisfac o ecuație a formei normale și corespund unui atractor de dimensiune mică.

În multe sisteme distribuite spațial, atraktorul are dimensiune fractală finită. Interesează dependența dimensiunii atraktorului, D , de dimensiunea L . Uzual se găsește o dependență de forma unei puteri [3]

$$D < L^a$$

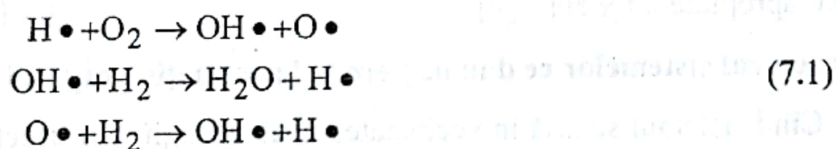
unde $a > 1$.

Un exemplu de sistem care prezintă haos spațiotemporal este dat în capitolul 8.

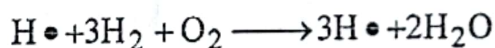
7. Sisteme chimice cu comportament neliniar

O trăsătură fundamentală a oricărui proces chimic care prezintă oscilații sau alte comportamente tipic neliniare este aceea a *feed-back-ului*. Anumiți intermediari sau produși trebuie să fie capabili să influențeze viteza pașilor precedenți. Acesta poate fi un proces catalitic pozitiv, în care speciile respective măresc viteza, sau o inhibare, prin care reacția este încetinită. Acest efect poate fi chimic, apărând din cinetica procesului, sau termic, apărând datorită faptului că energia disipată nu se pierde în totalitate în mediu, și creșterea de temperatură determinată influențează anumite constante de viteză [18].

Exemplu: Mecanismul prin care reacționează hidrogenul și oxigenul implică un ciclu de trei pași elementari



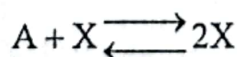
Dacă un atom de hidrogen intră în ciclu și toți radicalii $\text{OH} \bullet$ și $\text{O} \bullet$ produși reacționează pentru a produce înapoi $\text{H} \bullet$, atunci vor fi produși trei atomi de H; (1) + 2x(2) + (3) duce la reacția globală



Deoarece prima reacție din sistemul (7.1) este pasul determinant de viteză în ciclu, viteza cu care concentrația lui $\text{H} \bullet$ crește este

$$\frac{d[\text{H} \bullet]}{dt} = 2k_1[\text{H} \bullet][\text{O}_2]$$

unde semnul pozitiv al derivatei arată că există un feed-back pozitiv în acest ciclu. O transformare de tipul celei de mai sus se numește *reacție autocatalitică* și se scrie, în general, sub forma



Concentrația intermediarului X intervine în viteza cu care el este generat.

7.1. Reacții chimice în domeniul liniar al termodinamicii proceselor ireversibile. Reacții chimice și fenomene de relaxare

Fie un sistem omogen, izoterm, constituit din c substanțe, între care pot avea loc r reacții chimice. Dacă n_i este numărul de moli de specie i , iar v_{ij} este coeficientul stoechiometric al substanței i în reacția j , atunci variația numărului de moli de intermediar i în reacția j , în intervalul elementar de timp dt , este

$$d_j n_i = v_{ij} v_j dt \quad (7.2)$$

unde

$$v_j = \frac{1}{v_{ij}} \frac{d_j n_i}{dt} = \frac{d\xi_j}{dt} \quad (7.3)$$

este viteza reacției j , iar

$$d\xi_j = \frac{d_j n_i}{v_{ij}} \quad (7.4)$$

este gradul de avansare extensiv elementar al acesteia.

Variația elementară totală a numărului de moli de intermediar i este

$$dn_i = \sum_{j=1}^r d_j n_i = \sum_{j=1}^r v_{ij} d\xi_j \quad (7.5)$$

În absența proceselor de transport și la volum constant, producția de entropie este

$$P = \frac{d_i S}{dt} = \sum_{j=1}^r \frac{A_j}{T} v_j \quad (7.6)$$

unde

$$A_j = - \sum_{i=1}^c v_{ji} \mu_i \quad (7.7)$$

este afinitatea chimică a reacției j . Cu c am notat numărul de componenți din sistem. În cazul unei singure reacții, în sistem închis, producția de entropie este

$$P = \frac{A}{T} v \quad (7.8)$$

Producția de entropie este în general o formă biliniară în fluxuri și forțe termodinamice [1]. Fluxul termodinamic în acest caz este viteza de reacție v , iar forța care îl determină este proporțională cu afinitatea chimică, $X = A/T$. Pentru o reacție

chimică în vecinătatea echilibrului, există o relație liniară între fluxurile termodinamice și forțe

$$v = \frac{d\xi}{dt} = L \frac{A}{T} \quad (7.9)$$

Afinitatea de reacție depinde de compoziția sistemului, deci și de gradul de avansare a reacției. Dezvoltând afinitatea în serie Taylor în jurul echilibrului și notând mărimile de echilibru cu indicii eq, se obține

$$A = A_{eq} + \left(\frac{\partial A}{\partial \xi} \right)_{eq} (\xi - \xi_{eq}) + \dots \quad (7.10)$$

La echilibru, $A_{eq} = 0$; neglijând termenii de ordin superior în dezvoltarea (7.10), rezultă

$$A \approx \left(\frac{\partial A}{\partial \xi} \right)_{eq} (\xi - \xi_{eq}) \quad (7.11)$$

Înlocuind (7.11) în (7.9), găsim următoarea ecuație de evoluție pentru gradul de avansare extensiv al reacției

$$\frac{d\xi}{dt} = \frac{L}{T} \left(\frac{\partial A}{\partial \xi} \right)_{eq} (\xi - \xi_{eq}) \quad (7.12)$$

Pentru ca echilibrul chimic să fie stabil, trebuie îndeplinită condiția

$$\left(\frac{\partial A}{\partial \xi} \right)_{eq} < 0 \quad (7.13)$$

Introducem timpul de relaxare

$$\tau = - \frac{T}{L \left(\frac{\partial A}{\partial \xi} \right)_{eq}} \quad (7.14)$$

În conformitate cu (7.14), aceasta este o mărime pozitivă. Din (7.12) și (7.14), rezultă că

$$\frac{d\xi}{dt} = - \frac{\xi - \xi_{eq}}{\tau}$$

Prin separarea variabilelor și integrare, găsim dependența de timp a gradului de avansare. Abaterea față de echilibru este

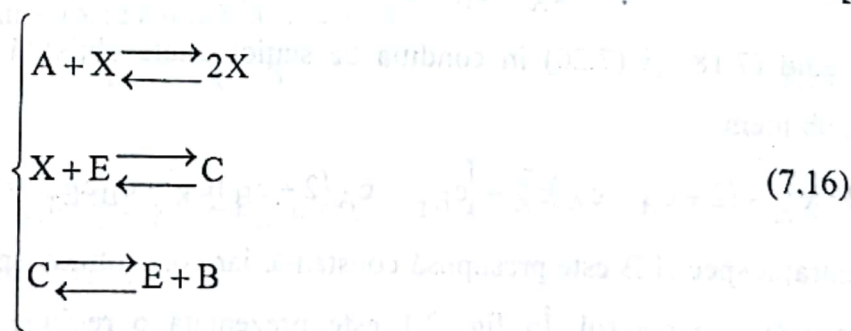
$$\xi - \xi_{eq} = (\xi_0 - \xi_{eq})e^{-t/\tau} \quad (7.15)$$

În vecinătatea echilibrului, reacția poate fi considerată un proces de relaxare, în care variabila ξ tinde către valoarea sa de echilibru, după o lege exponențială. În cazul mai multor reacții chimice, sistemul se caracterizează printr-un spectru al timpilor de relaxare.

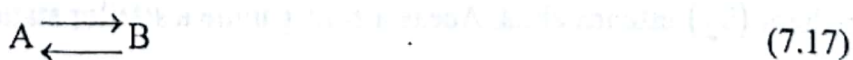
Rezultă că, în apropierea echilibrului chimic (în domeniul liniar al termodinamicii proceselor ireversibile), este imposibilă apariția structurilor ordonate în sisteme chimice. Acest fapt este confirmat și de teorema producției minime de entropie; conform acesteia, singurul atractor stabil în domeniul liniar al termodinamicii proceselor ireversibile este starea staționară [1]. Apariția structurilor ordonate în sisteme chimice este posibilă doar departe de echilibru, când fluxurile termodinamice sînt funcții neliniare de forțele termodinamice.

7.2. Sisteme cu stări staționare multiple

În multe situații, ecuațiile stării staționare au o singură soluție, corespunzînd ramurii termodinamice. Pentru abateri suficient de mari față de echilibru, această ramură devine instabilă. Pot exista de asemenea situații în care ecuațiile stării staționare au mai mult de o soluție stabilă, după ce ramura termodinamică atinge punctul de instabilitate. Ca un exemplu, considerăm modelul propus de Edelstein [19]



Reacția globală este obținută prin adunarea pașilor de reacție din (7.16)



Mecanismul de reacție (7.16) constă în producerea autocatalitică a lui X, degradarea sa enzimatică și refacerea enzimei. Concentrațiile speciilor A și B sînt considerate constante. Impunem condiția de conservare a enzimei

$$c_E + c_C = c_{E_T} = \text{const.} \quad (7.18)$$

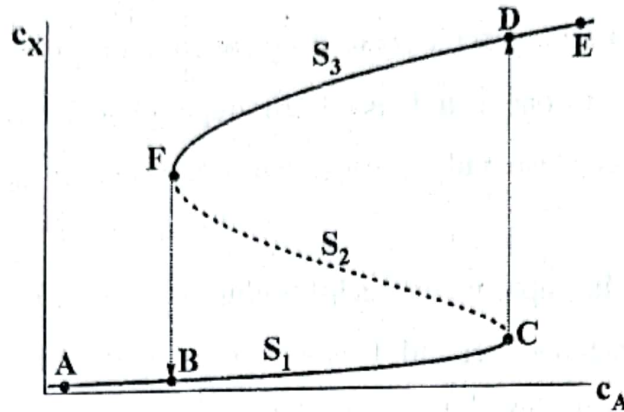


Fig. 7.1

Considerăm, pentru simplitate, toate constantele cinetice egale cu unitatea. Ecuațiile cinetice sînt

$$\begin{cases} \frac{dc_X}{dt} = c_A c_X - c_X^2 - c_X c_E + c_C \\ \frac{dc_E}{dt} = -c_X c_E - c_B c_E + 2c_C \end{cases} \quad (7.19)$$

La starea staționară, a doua ecuație (7.19) conduce la

$$-c_X c_E - c_B c_E + 2c_C = 0$$

Înlocuind în această ecuație valoarea lui c_C obținută din (7.18), găsim că

$$c_E = \frac{2c_{E_T}}{c_X + c_B + 2} \quad (7.20)$$

Substituind (7.18) și (7.20) în condiția de staționaritate obținută din prima ecuație (7.19), obținem

$$f(c_X) = c_X^3 + (2 + c_B - c_A)c_X^2 + [c_{E_T} - c_A(2 + c_B)]c_X - c_B c_{E_T} = 0 \quad (7.21)$$

Concentrația speciei B este presupusă constantă, iar concentrația speciei A joacă rolul de parametru de control. În fig. 7.1 este prezentată o regiune în care apar stări staționare multiple. Starea inferioară (S_1) și cea superioară (S_3) sînt stabile, iar starea intermediară (S_2) este instabilă. Această configurație a stărilor staționare conduce la un *comportament histeretic* al sistemului considerat, caracteristic sistemelor neliniare.

Presupunem că, inițial, sistemul se află în A. Crescînd valoarea parametrului de control, sistemul urmează curba ABC, starea staționară S_1 fiind stabilă. În momentul

în care sistemul atinge punctul C, starea S_2 fiind instabilă, are loc un salt pe S_3 (stabilă), în D. Crescînd în continuare parametrul de control, sistemul urmează curba S_3 (segmentul DE). Considerăm acum E drept stare inițială. Scăzînd parametrul de control, sistemul urmează calea EDF (starea S_3 este stabilă). În F, datorită instabilității stării S_2 , sistemul suferă un salt pe S_1 . Scăzînd în continuare parametrul de control, sistemul urmează calea BA (starea S_1 este stabilă). Comportamentul sistemului depinde în acest caz de istoria procesului, adică de condiția inițială și de calea care este urmată, dată de sensul de variație al parametrului de control.

7.3. Un model de reacție chimică cu tranziție de fază de neechilibru

Considerăm schema de reacție propusă de Schlögl [20]



Concentrațiile speciilor A, B și C sînt menținute constante. Ecuația cinetică pentru concentrația speciei X este

$$\frac{dc_X}{dt} = k_1 c_A c_X^2 - k_{-1} c_X^3 - k_2 c_B c_X + k_{-2} c_C \quad (7.23)$$

Cu o alegere corespunzătoare a unităților, rezultă

$$k_{-1} = 1; \quad k_1 c_A = 3 \quad (7.24)$$

Notăm

$$k_{-2} c_C = \gamma; \quad -k_2 c_B = \beta \quad (7.25)$$

Cu (7.24) și (7.25), (7.23) devine

$$\frac{dc_X}{dt} = -c_X^3 + 3c_X^2 - \beta c_X + \gamma = F(c_X) \quad (7.26)$$

Soluțiile stării staționare pentru (7.26) sînt date de

$$c_X^3 - 3c_X^2 + \beta c_X = \gamma \quad (7.27)$$

În acord cu (7.27), la intersecția lui $y = F(c_X)$ cu $y = \gamma$, se găsesc stările staționare.

Derivata funcției F este

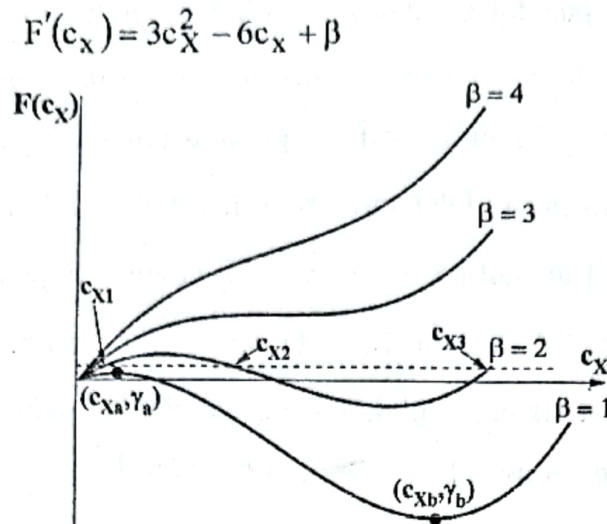


Fig. 7.2

Aceasta se anulează în

$$c_{Xa} = 1 - \sqrt{1 - \frac{\beta}{3}}; c_{Xb} = 1 + \sqrt{1 - \frac{\beta}{3}} \quad (7.28)$$

dacă $\beta \leq 3$. Înlocuind (7.28) în (7.26), se obțin valorile extreme ale lui F

$$\gamma_a = \beta - 2 + \left(2 - \frac{2\beta}{3}\right) \sqrt{1 - \frac{\beta}{3}}; \gamma_b = \beta - 2 - \left(2 - \frac{2\beta}{3}\right) \sqrt{1 - \frac{\beta}{3}} \quad (7.29)$$

Pentru $\beta \geq 3$, există numai o singură stare staționară pentru orice γ . Pentru $\beta < 3$, există trei valori staționare, c_{X1} , c_{X2} și c_{X3} , dacă γ se află în intervalul corespunzător (Acest interval este $[0, \gamma_a]$ dacă $\gamma_b < 0$ sau $[\gamma_b, \gamma_a]$ dacă $\gamma_b > 0$). Pentru γ în afara acestui domeniu, există o singură stare staționară. Studiem stabilitatea celor trei stări staționare. Pentru $\beta > 3$, singura stare staționară a sistemului este stabilă, deoarece $dF/dc_X < 0$. Pentru $\beta < 3$,

$$\left. \begin{array}{l} c_X = c_{X1} \\ c_X = c_{X3} \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \frac{dF}{dc_X} \right|_{c_{Xi}} < 0, \text{ s.s. stabile} \quad (7.30)$$

$$c_X = c_{X2} \Rightarrow \left. \frac{dF}{dc_X} \right|_{c_{X2}} > 0, \text{ s.s. instabila}$$

Pe starea staționară instabilă, dacă fluctuația spontană δc_X este pozitivă, sistemul va ajunge în punctul stabil 3. Dacă fluctuația δc_X este negativă, starea finală va fi 1.

Analogia cu stările de echilibru ale unui gaz van der Waals a făcut ca

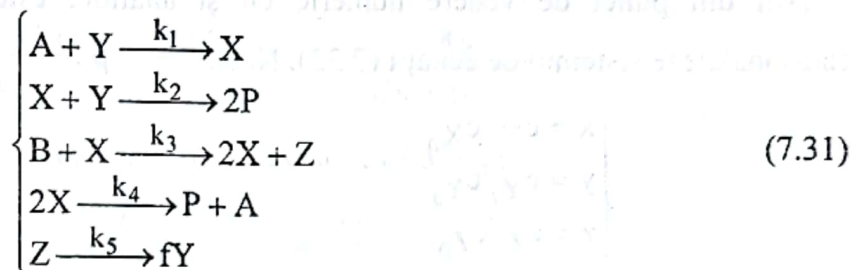
acest comportament să se numească *tranziție de fază de neechilibru* de ordinul I [20].

7.4. Oregonatorul

Cel mai simplu model al reacției oscilante Belousov-Zhabotinski a fost propus de Field și Noyes, și poartă numele de Oregonator [21]. Notăm $A = [\text{BrO}_3^-]$, $B = [\text{BrMA}]$, P este un produs ($P = [\text{HBrO}]$), unde, cu MA s-a notat acidul malonic. Concentrațiile variabilelor dinamice sînt

$$X = [\text{HBrO}_2], Y = [\text{Br}^-], Z = [\text{Ce}^{4+}]$$

Sistemul cuprinde cinci pași 'elementari' de reacție



Concentrațiile $c_A = c_B$ sînt presupuse constante și joacă rolul de parametru de control. În scrierea din (7.31), constantele de viteză k_i conțin concentrația protonilor, care este presupusă constantă (aproximația rezervorului). Prima reacție din (7.31) descrie conversia lui Y la X ; a doua reprezintă inactivarea lui X și Y ; a treia, producerea autocatalitică a lui X ; a patra, descompunerea bimoleculară a lui X și ultima, regenerarea lui Y din Z .

Dinamica sistemului este descrisă de ecuațiile de evoluție

$$\begin{cases} \frac{dc_X}{dt} = k_1 c_A c_Y - k_2 c_X c_Y + k_3 c_B c_X - 2k_4 c_X^2 \\ \frac{dc_Y}{dt} = -k_1 c_A c_Y - k_2 c_X c_Y + f k_5 c_Y \\ \frac{dc_Z}{dt} = k_3 c_B c_X - k_5 c_Z \end{cases} \quad (7.32)$$

unde parametrii k_i sînt în domeniul $(1, 10^9)$. Aceasta face ca sistemul să evolueze după scale de timp foarte diferite. Sistemul de ecuații diferențiale (7.32) cu acest tip de proprietate a constantelor de viteză se numește *rigid* (engl. 'stiff'). f reprezintă un coeficient stoechiometric pentru reacția globală

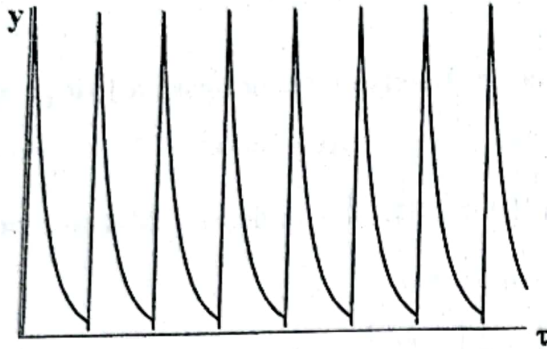


Fig. 7.3 a

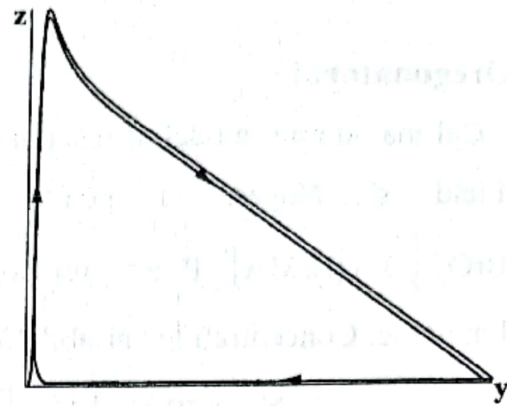


Fig. 7.3 b

Atît din punct de vedere numeric cît și analitic, este mai comod să se adimensionalizeze sistemul de ecuații (7.32). Notăm

$$\begin{cases} x = c_X / c_{X_0} \\ y = c_Y / c_{Y_0} \\ z = c_Z / c_{Z_0} \\ \tau = t / T_0 \end{cases} \quad (7.33)$$

unde c_{X_0} , c_{Y_0} și c_{Z_0} au dimensiunea unei concentrații și se numesc *concentrații caracteristice*, iar T_0 are dimensiunea unui timp și reprezintă un timp caracteristic. Aceste constante trebuie specificate, iar alegerea lor nu este unică. Înlocuind (7.33) în (7.32), se obține sistemul

$$\begin{cases} \frac{dx}{d\tau} = \frac{k_1 c_A c_{Y_0} T_0}{c_{X_0}} y - k_2 c_{Y_0} T_0 xy + k_3 c_B T_0 x - 2k_4 c_{X_0} T_0 x^2 \\ \frac{dy}{d\tau} = -k_1 c_A T_0 y - k_2 c_{X_0} T_0 xy + \frac{k_5 c_{Z_0} T_0}{c_{Y_0}} z \\ \frac{dz}{d\tau} = \frac{k_3 c_B c_{X_0} T_0}{c_{Z_0}} x - k_5 T_0 z \end{cases} \quad (7.34)$$

Pentru simplitate, impunem condiția de egalitate a coeficienților lui y , xy și x din prima ecuație, a lui x și z din ultima. Rezultă

$$c_{X_0} = \frac{k_1 c_A}{k_2}; \quad c_{Y_0} = \frac{k_3 c_B}{k_2}; \quad c_{Z_0} = \frac{k_1 k_3 c_A c_B}{k_2 k_5} \quad (7.35)$$

Alegem timpul caracteristic astfel încît

$$\tau = \sqrt{k_1 k_3 c_A c_B} t \Rightarrow dt = \frac{d\tau}{\sqrt{k_1 k_3 c_A c_B}} \quad (7.36)$$

Cu (7.35) și (7.36), ecuațiile (7.34) devin

$$\begin{cases} \frac{dx}{d\tau} = \sqrt{\frac{k_3 c_B}{k_1 c_A}} \left(y - xy + x - 2 \frac{k_1 k_4 c_A}{k_2 k_3 c_B} x^2 \right) \\ \frac{dy}{d\tau} = \sqrt{\frac{k_1 c_A}{k_3 c_B}} (-y - xy + fz) \\ \frac{dz}{d\tau} = \frac{k_5}{\sqrt{k_1 k_3 c_A c_B}} (x - z) \end{cases} \quad (7.37)$$

Notăm

$$s = \sqrt{\frac{k_3 c_B}{k_1 c_A}}; q = \frac{2k_1 k_4 c_A}{k_2 k_3 c_B}; w = \frac{k_5}{\sqrt{k_1 k_3 c_A c_B}} \quad (7.38)$$

Cu aceste notații, sistemul ecuațiilor de evoluție (7.37) devine

$$\begin{cases} \frac{dx}{d\tau} = s(x + y - xy - qx^2) \\ \frac{dy}{d\tau} = (-y - xy + fz)/s \\ \frac{dz}{d\tau} = w(x - z) \end{cases} \quad (7.39)$$

Coeficienții s , q și w vor juca rolul de parametri de control. Punctul fix al ecuațiilor (7.39) este

$$\begin{cases} x_0 = z_0 = \left\{ 1 - f - q + \left[(1 - f - q)^2 + 4q(1 + f) \right]^{1/2} \right\} / 2q \\ y_0 = \frac{fx_0}{1 + x_0} \end{cases} \quad (7.40)$$

Sistemul inițial, (7.32), are șapte parametri, iar sistemul adimensionalizat (7.39) are numai trei parametri. Pentru valori corespunzătoare ale parametrilor de control, sistemul prezintă oscilații de tip ciclu limită. Fig. 7.3 a și b prezintă evoluția în timp, respectiv portretul fazelor, pentru $q = 8,375 \cdot 10^{-6}$, $s = 77,27$ și $w = 16,1$. Oscilațiile sînt *de relaxare*: un timp lung în sistem au loc transformări foarte lente, apoi, într-un timp foarte scurt, au loc modificări foarte rapide. Această proprietate este legată de timpii caracteristici mult diferiți existenți în sistem.

7.5. Sisteme de tip activator-inhibitor

Considerăm următorul model, inspirat de cinetica sistemelor biologice [13]

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = a - bu + \frac{u^2}{v(1 + Ku^2)} = f(u, v) \\ \frac{dv}{dt} = u^2 - v = g(u, v) \end{cases} \quad (7.41)$$

unde a , b și K sînt constante. Acesta este un sistem de tip *activator* (u) – *inhibitor* (v).
Sistemul descrie:

- o producție autocatalitică a lui u , datorată termenului $\frac{u^2}{v(1 + Ku^2)}$. Acest termen se saturează, pentru valori mari ale lui u , la $1/(Kv)$.
- activatorul u determină, de asemenea, creșterea concentrației inhibitorului v , prin termenul u^2 , din cea de-a doua ecuație (7.41).
- inhibitorul v inhibă producerea activatorului u . La creșterea concentrației lui v , termenul $\frac{u^2}{v(1 + Ku^2)}$ scade.
- inhibitorul v inhibă propria producție, prin termenul $-v$, din a doua ecuație (7.41).

Considerăm matricea

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial u} & \frac{\partial f}{\partial v} \\ \frac{\partial g}{\partial u} & \frac{\partial g}{\partial v} \end{pmatrix} \quad (7.42)$$

evaluată în punctul fázic corespunzător stării instantanee a sistemului. Pentru sisteme de tip activator-inhibitor, elementele acesteia trebuie să aibă semnele

$$\begin{pmatrix} + & - \\ + & - \end{pmatrix} \quad (7.43)$$

Aplicația 7.1

Considerăm următoarele sisteme de tip activator-inhibitor [13]

$$a) \begin{cases} \frac{du}{dt} = a - bu + \frac{u^2}{v} = f(u, v) \\ \frac{dv}{dt} = u^2 - v = g(u, v) \end{cases} \quad (7.44)$$

$$b) \begin{cases} \frac{du}{dt} = a - u + u^2 v \\ \frac{dv}{dt} = b - u^2 v \end{cases} \quad (7.45)$$

unde a și b sînt constante pozitive. Care este activatorul și care este inhibitorul? Trasați nulclinele sistemelor. Determinați stările staționare și studiați stabilitatea acestora.

Rezolvare

Pentru prima ecuație (7.44), nulclina este

$$v = \frac{u^2}{bu - a} \quad (7.46)$$

Deoarece u și v sînt pozitive, rezultă că trebuie îndeplinită condiția $u > a/b$. Nulclina

(7.46) are asimptotă verticală în $u = \frac{a}{b}$ și un minim în $u = \frac{2a}{b}$. Pe intervalul

$u \in \left(\frac{a}{b}, \frac{2a}{b}\right)$ nulclina este descrescătoare, iar pentru $u > \frac{2a}{b}$ este crescătoare, cu

asimptotă oblică pentru $u \rightarrow \infty$. Nulclina $g = 0$ conduce la $v = u^2$. Semnele pentru f și g funcție de u și v sînt prezentate în fig. 7.4 b.

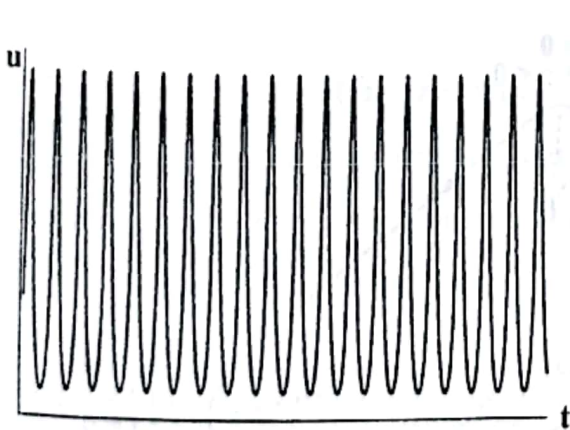


Fig. 7.4 a

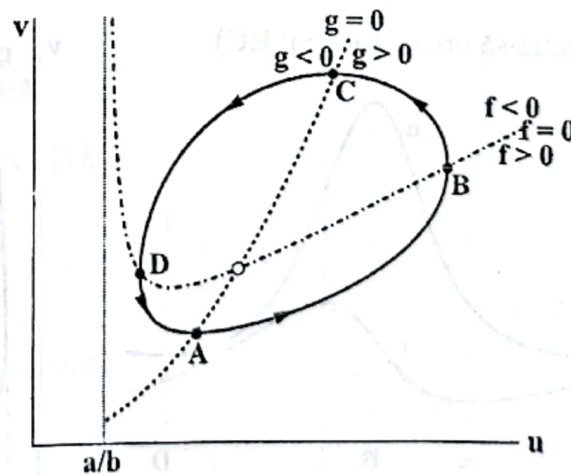


Fig. 7.4 b

La intersecția celor două nulcline, există o stare staționară unică

$$\begin{cases} u_0 = \frac{a+1}{b} \\ v_0 = \left(\frac{a+1}{b}\right)^2 \end{cases} \quad (7.47)$$

Ecuția caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} \frac{b(1-a)}{1+a} - \omega & -\frac{b^2}{(a+1)^2} \\ \frac{2(a+1)}{b} & -1 - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (7.48)$$

Se observă că matricea Jacobiană satisface (7.43). Ecuția (7.48) conduce la

$$\omega^2 + \omega \left[1 + \frac{b(a-1)}{a+1} \right] + b = 0 \quad (7.49)$$

Condiția de instabilitate este îndeplinită dacă

$$b > \frac{1+a}{1-a} \quad (7.50)$$

Fig. 7.4 a prezintă evoluția în timp, pentru $a=0,5$ și $b=4$. Sistemul oscilează periodic, avînd un comportament de tip ciclu limită. Considerăm că, inițial, concentrațiile de activator și inhibitor sînt mici (punctul A de pe ciclul limită, în fig. 7.4 b și c). Activatorul stimulează propria producere și producerea inhibitorului ($f > 0, g > 0$); ca urmare, u și v cresc (arcul AB de pe ciclul limită). Cînd concentrația de inhibitor atinge o valoare critică, f devine negativă. Ca urmare, u scade și v continuă să crească (arcul BC).

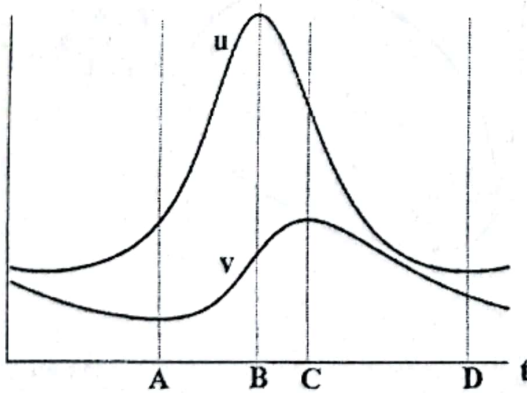


Fig. 7.4 c

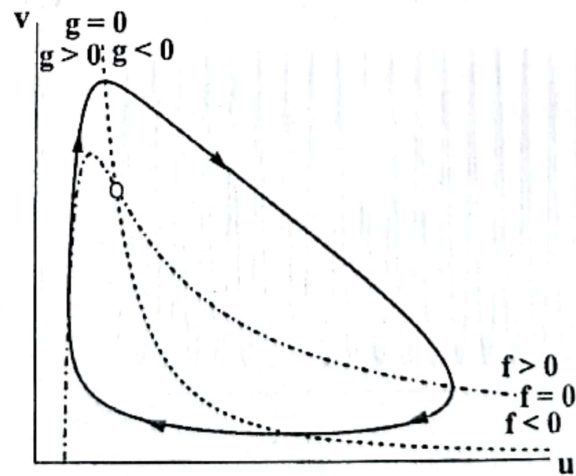


Fig. 7.5

Cînd este atins punctul C, atît f cît și g devin negative, deci u și v scad (arcul CD). Cînd este atins punctul D, concentrația de inhibitor este suficient de mică încît să fie

reluată producția de activator. u începe să crească, în timp ce v continuă să scadă, până în punctul A, când ciclul se repetă.

b) Nulclinele corespunzătoare sistemului (7.45) sînt

$$\begin{cases} v = \frac{u-a}{u^2} \\ v = \frac{b}{u^2} \end{cases} \quad (7.51)$$

La intersecția acestora, sistemul prezintă o singură stare staționară

$$u_0 = a + b; v_0 = \frac{b}{(a+b)^2} \quad (7.52)$$

Ecuția caracteristică are forma

$$\begin{vmatrix} \frac{b-a}{b+a} - \omega & (a+b)^2 \\ -\frac{2b}{a+b} & -(a+b)^2 - \omega \end{vmatrix} = 0 \quad (7.53)$$

Aici, u joacă rolul de inhibitor (dacă $b < a$) și v rolul de activator. Dezvoltînd (7.53), rezultă

$$\omega^2 + \omega \left[1 + \frac{a-b}{(a+b)^3} \right] + (a+b)^2 = 0 \quad (7.54)$$

Starea staționară este instabilă dacă coeficientul lui ω este negativ. Ciclul limită și nulclinele din fig. 7.5 sînt trasate pentru $a = 0.1$ și $b = 0.2$.

7.6. Oscilații în sistem izoterm închis

Considerăm transformările chimice [18]:

- precursorul P trece în intermediarul A



Intermediarul A este convertit în B necatalizat



și printr-un proces autocatalitic, cu autocataliză cubică



În cele din urmă, intermediarul B trece în produsul de reacție



Intermediarii A și B sînt presupuși mult mai reactivi decît precursorul P.

Pentru reacțiile de mai sus, ecuațiile cinetice sînt

$$\begin{cases} \frac{dp}{dt} = -k_0 p \\ \frac{da}{dt} = k_0 p - k_1 a b^2 - k_u a \\ \frac{db}{dt} = k_1 a b^2 + k_u a - k_2 b \end{cases} \quad (7.59)$$

unde cu p, a și b am notat concentrațiile speciilor corespunzătoare. Concentrația produsului de reacție C poate fi evaluată la orice moment de timp din ecuația

$$p + a + b + c = p_0 + a_0 + b_0 + c_0 \quad (7.60)$$

unde, cu indicele 0 sînt notate concentrațiile inițiale. Ecuațiile de evoluție (7.59) admit o singură stare staționară

$$\begin{cases} p_e = a_e = b_e = 0 \\ c_e = p_0 + a_0 + b_0 + c_0 \end{cases} \quad (7.61)$$

care este chiar starea de echilibru. Aceasta corespunde conversiei complete în produs de reacție. Pentru a simplifica ecuațiile de evoluție (7.59), trecem la variabile adimensionale. Alegem drept timp caracteristic

$$t_C = 1/k_2 \quad (7.62)$$

și drept concentrație caracteristică

$$c_C = \left(\frac{k_2}{k_1} \right)^{1/2} \quad (7.63)$$

Timpul adimensional este

$$\tau = \frac{t}{t_C} = k_2 t \quad (7.64)$$

Concentrațiile adimensionale sînt

$$\pi = \frac{p}{c_C}; \quad \alpha = \frac{a}{c_C}; \quad \beta = \frac{b}{c_C} \quad (7.65)$$

Înlocuind (7.64) și (7.65) în ecuațiile cinetice (7.59) și ținînd cont de (7.62) și (7.63), se obțin ecuațiile cinetice adimensionale

$$\begin{cases} \frac{d\pi}{d\tau} = -\varepsilon\pi \\ \frac{d\alpha}{d\tau} = \varepsilon\pi - \alpha\beta^2 - \kappa_u\alpha \\ \frac{d\beta}{d\tau} = \alpha\beta^2 + \kappa_u\alpha - \beta \end{cases} \quad (7.66)$$

unde am notat

$$\varepsilon = \frac{k_0}{k_2} \text{ și } \kappa_u = \frac{k_u}{k_2} \quad (7.67)$$

Considerăm că inițial în sistem se află doar precursorul P

$$\pi(\tau=0) = \pi_0; \alpha(\tau=0) = \beta(\tau=0) = 0 \quad (7.68)$$

Ecuția de evoluție pentru π din (7.66), cu condiția inițială corespunzătoare din (7.68), are soluția

$$\pi = \pi_0 e^{-\varepsilon\tau} \quad (7.69)$$

Pentru ca precursorul să se descompună lent, trebuie ca $\varepsilon \ll 1$. După (7.67), această condiție este echivalentă cu $k_0 \ll k_2$. Notăm

$$\begin{cases} \mu_0 = \varepsilon\pi_0 \\ \mu = \varepsilon\pi = \mu_0 e^{-\varepsilon\tau} \end{cases} \quad (7.70)$$

Cu notația (7.70), ecuațiile de evoluție (7.66) devin

$$\begin{cases} \frac{d\alpha}{d\tau} = \mu - \alpha\beta^2 - \kappa_u\alpha \\ \frac{d\beta}{d\tau} = \alpha\beta^2 + \kappa_u\alpha - \beta \end{cases} \quad (7.71)$$

Intermediarii A și B fiind foarte reactivi, putem presupune, într-o primă aproximație, că satisfac ipoteza stării staționare

$$\frac{d\alpha}{d\tau} = \frac{d\beta}{d\tau} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \mu - \alpha\beta^2 - \kappa_u\alpha = 0 \\ \alpha\beta^2 + \kappa_u\alpha - \beta = 0 \end{cases} \quad (7.72)$$

Soluțiile sistemului algebric (7.72) sînt de forma (fig. 7.6)

$$\begin{cases} \alpha_{SS} = \frac{\mu}{\kappa_u + \mu^2} \\ \beta_{SS} = \mu \end{cases} \quad (7.73)$$

Graficele celor două mărimi, α și β , se intersectează în

$$\alpha_{SS} = \beta_{SS} = \mu = (1 - \kappa_u)^{1/2} \quad (7.74)$$

Graficul lui α admite un maxim în

$$\left(\mu = \kappa_u^{1/2}, \alpha = \frac{1}{2} \kappa_u^{-1/2} \right) \quad (7.75)$$

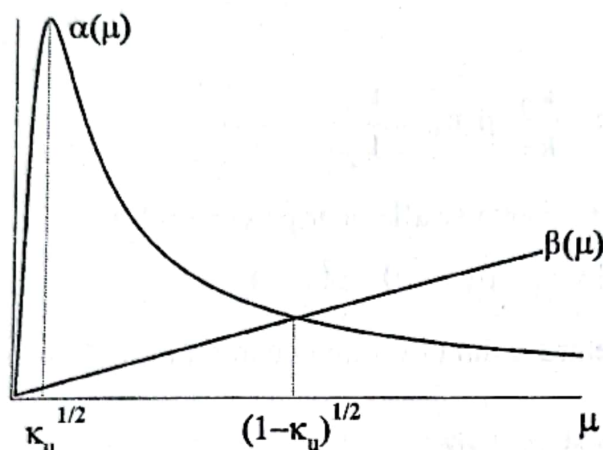


Fig. 7.6

Dependența de timp a stărilor pseudostaționare se obține înlocuind (7.70) în (7.73)

$$\begin{cases} \alpha_{SS} = \frac{\mu_0 e^{-\varepsilon\tau}}{\kappa_u + \mu_0^2 e^{-2\varepsilon\tau}} \\ \beta_{SS} = \mu_0 e^{-\varepsilon\tau} \end{cases} \quad (7.76)$$

Fig. 7.7 a prezintă evoluția în timp a concentrației precursorului, dată de (7.69). Aceasta scade exponențial în timp, după un timp caracteristic egal cu $1/\varepsilon$. Fig. 7.7 b prezintă variația în timp a concentrației intermediarilor A și B. Concentrația lui B scade exponențial în timp, iar concentrația lui A are un maxim. Cele două grafice se intersectează, în acord cu (7.70) și (7.74), în

$$\tau_{int} = \frac{1}{\varepsilon} \ln \frac{\mu_0}{(1 - \kappa_u)^{1/2}} \quad (7.77)$$

Valoarea maximă a concentrației lui A este atinsă, după (7.70) și (7.75), pentru

$$\tau_{max} = \frac{1}{\varepsilon} \ln \frac{\mu_0}{\kappa_u^{1/2}} \quad (7.78)$$

Precursorul P se descompune foarte lent în timp; ca urmare, μ poate fi privit ca un parametru, lent variabil în timp. Variația sa poate duce, în anumite condiții, la destabilizarea stării staționare [18].

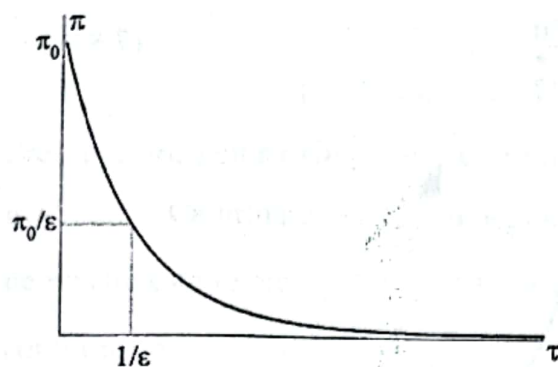


Fig. 7.7 a

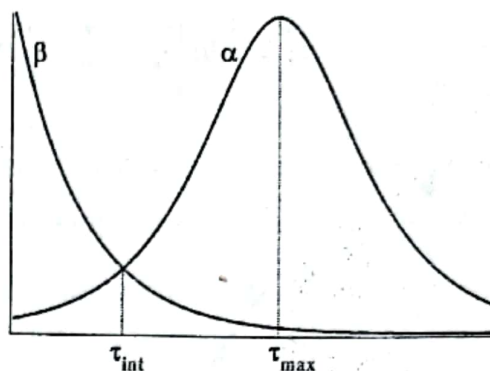


Fig. 7.7 b

Pornind de la ecuațiile de evoluție (7.71) și valorile concentrațiilor la starea pseudostaționară, date de (7.73), studiem stabilitatea stării pseudostaționare. Matricea Jacobiană, evaluată la starea pseudostaționară, este

$$J = \begin{pmatrix} -(\mu^2 + \kappa_u) & -\frac{2\mu^2}{\mu^2 + \kappa_u} \\ \mu^2 + \kappa_u & \frac{\mu^2 - \kappa_u}{\mu^2 + \kappa_u} \end{pmatrix} \quad (7.79)$$

Determinantul matricei Jacobiene este $\det(J) = \mu^2 + \kappa_u$. Acesta este mereu pozitiv.

Trasa matricei Jacobiene (7.79) este

$$\text{tr}(J) = \frac{-\mu^4 + \mu^2(1 - 2\kappa_u) - \kappa_u(1 + \kappa_u)}{\mu^2 + \kappa_u} \quad (7.80)$$

Pentru ca aceasta să se anuleze, trebuie satisfăcută condiția $\kappa_u < 1/8$. În această situație, soluțiile pozitive ale ecuației $\text{tr}(J) = 0$ sînt

$$\mu_{1,2}^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(1 - 2\kappa_u) \pm (1 - 8\kappa_u)^{1/2} \right]^{1/2} \quad (7.81)$$

Starea pseudostaționară este focar instabil atît timp cît

$$\mu_2^* < \mu_0 e^{-\varepsilon\tau} < \mu_1^* \quad (7.82)$$

Cînd condiția (7.82) este satisfăcută, sistemul prezintă oscilații. Din (7.82) rezultă că oscilațiile au loc în intervalul de timp

$$\tau_1^* < \tau < \tau_2^* \quad (7.83)$$

unde

$$\tau_1^* = \frac{1}{\varepsilon} \ln \frac{\mu_0}{\mu_1^*}; \tau_2^* = \frac{1}{\varepsilon} \ln \frac{\mu_0}{\mu_2^*} \quad (7.84)$$

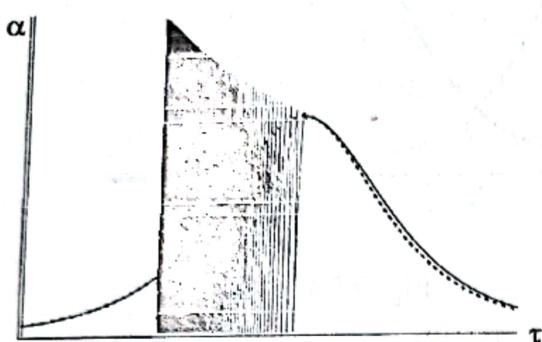


Fig. 7.8 a

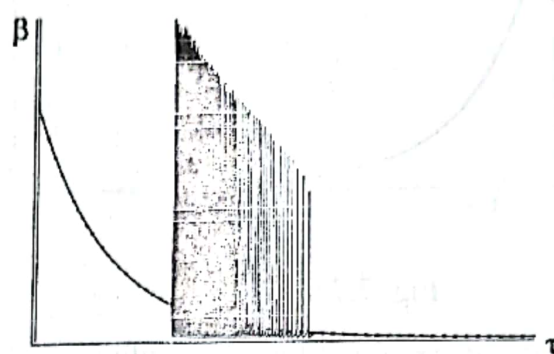


Fig. 7.8 b

Timpul τ_1^* , care dă lungimea perioadei preoscilatorii, va fi pozitiv dacă concentrația inițială, μ_0 , depășește punctul superior de bifurcație Hopf, μ_1^* . Dacă $\mu_2^* < \mu_0 < \mu_1^*$, nu va exista perioadă preoscilatorie: sistemul va începe să oscileze de la început, iar oscilațiile vor dura până la $\tau = \tau_2^*$. Pentru valori foarte mici ale concentrației inițiale, $\mu_0 < \mu_2^*$, nu apar oscilații. Fig. 7.8 a și b prezintă evoluția temporală pentru concentrațiile intermediarilor A și B, în aproximația stării cuasistaționare (linia întreruptă) și evoluția obținută prin integrarea numerică a sistemului complet al ecuațiilor de evoluție (7.71) (linie continuă), pentru $\varepsilon = 10^{-3}$, $\kappa_u = 0,01$, $\mu_0 = 5$ [18]. Pentru aceste valori ale parametrilor, din (7.81) se obțin $\mu_1^* = 0,985$ și $\mu_2^* = 0,102$. Înlocuind aceste valori în (7.84), se obține o perioadă preoscilatorie $\tau_1^* = 1625$ și un timp de extincție a oscilațiilor $\tau_2^* = 3892$.

7.7. Oscilații termocinetice în sistem închis

În acest model, autocataliza este înlocuită de feedback-ul termic: creșterea temperaturii amestecului de reacție conduce la creșterea valorii locale a constantei de viteză. Considerăm sistemul închis: acesta face schimb de căldură, dar nu face schimb de substanță cu exteriorul. Considerăm două reacții succesive de ordinul I, care convertesc un precursor P într-un produs final B, printr-o singură specie intermediară

A [18]



Presupunem, pentru simplitate, că primul pas este atermic și are energia de activare neglijabilă. Ca urmare, k_0 nu va depinde de temperatură. Presupunem că al doilea pas de reacție este exoterm ($\Delta H_1 < 0$), iar constanta de viteză k_1 depinde de temperatură conform ecuației Arrhenius

$$k_1 = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right), \quad E > 0 \quad (7.86)$$

Notăm

$$Q = -\Delta H_1 > 0 \quad (7.87)$$

căldura primită de mediu datorită celei de-a doua reacții.

Considerăm un vas de volum V , cu agitare perfectă, într-un termostat aflat la temperatura T_a . Temperatura amestecului de reacție este T . Aceasta variază datorită reacției exoterme din reactor și datorită schimbului de căldură cu mediul. Ecuația de bilanț a energiei interne are forma

$$\frac{dU}{dt} = \left(\frac{dU}{dt}\right)_{\text{reacție}} + \left(\frac{\delta Q}{dt}\right)_{\text{transfer}} \quad (7.88)$$

Variația elementară a energiei interne poate fi scrisă

$$dU = mcdT \quad (7.89)$$

unde m este masa de reacție, iar c este căldura specifică. Masa este

$$m = \rho V \quad (7.90)$$

unde ρ este densitatea amestecului de reacție. Din (7.89) și (7.90), rezultă

$$\frac{dU}{dt} = \rho V c \frac{dT}{dt} \quad (7.91)$$

Calculăm termenul de reacție din (7.88). Viteza extensivă de reacție a pasului exoterm este

$$\frac{d\xi_1}{dt} = k_1 a V \quad (7.92)$$

La o variație elementară a gradului de avansare extensiv, $d\xi_1$, valoarea absolută a căldurii degajate de reacție este

$$(dU)_{\text{reactie}} = Q d\xi_1$$

În unitatea de timp

$$\left(\frac{dU}{dt}\right)_{\text{reactie}} = Q \frac{d\xi_1}{dt} = Q k_1(T) a V \quad (7.93)$$

Schimbul de căldură între reactor și mediu este descris de ecuația lui Newton

$$|\vec{j}_q| = \chi \Delta T \quad (7.94)$$

unde $\vec{j}_q$ este fluxul de căldură, iar ΔT este diferența de temperatură dintre sistem și mediu

$$\Delta T = T - T_a \quad (7.95)$$

Parametrul χ se numește coeficient de transfer termic. Conform definiției, fluxul de căldură este

$$|\vec{j}_q| = \frac{1}{S} \left(\frac{\delta Q}{dt}\right)_{\text{transfer}} \quad (7.96)$$

unde S este aria suprafeței prin care are loc transferul de căldură. Din (7.94) și (7.96), rezultă că

$$\left(\frac{\delta Q}{dt}\right)_{\text{transfer}} = S \chi (T - T_a) \quad (7.97)$$

Înlocuind (7.93) și (7.97) în (7.88), rezultă că

$$V_{pc} \frac{dT}{dt} = Q V k_1(T) a - S \chi (T - T_a) \quad (7.98)$$

În această ecuație, se observă modalitatea de apariție a cuplajului termic, datorită dependenței de temperatură a constantei de viteză k_1 . O creștere a temperaturii T duce la creșterea lui k_1 , deci la creșterea vitezei de producere a căldurii. Datorită dependenței exponențiale (7.86), feedback-ul este puternic neliniar.

Ecuatiile de bilanț pentru masă sînt ecuațiile cinetice

$$\begin{cases} \frac{dp}{dt} = -k_0 p \\ \frac{da}{dt} = k_0 p - k_1(T) a \end{cases} \quad (7.99)$$

Considerăm condițiile inițiale

$$p(t=0) = p_0; a(t=0) = 0; b(t=0) = 0; T(t=0) = T_a \quad (7.100)$$

Inițial în sistem se află doar precursor, iar temperatura în reactor este egală cu temperatura mediului. Prima ecuație (7.99) are soluție de forma

$$p(t) = p_0 e^{-k_0 t} \quad (7.101)$$

Concentrația precursorului scade exponențial în timp. Înlocuind (7.101) în a doua ecuație (7.99) și ținând cont de (7.98), rezultă

$$\begin{cases} \frac{da}{dt} = k_0 p_0 e^{-k_0 t} - k_1(T)a \\ V\rho c \frac{dT}{dt} = QV k_1(T)a - S\chi(T - T_a) \end{cases} \quad (7.102)$$

Adimensionalizăm ecuațiile de evoluție (7.102). Concentrațiile adimensionale sînt

$$\alpha = \frac{a}{c_{\text{ref}}}; \pi = \frac{p}{c_{\text{ref}}} \quad (7.103)$$

unde c_{ref} este o concentrație caracteristică, care va fi specificată ulterior. Creșterea adimensională de temperatură este

$$\theta = \frac{E(T - T_a)}{RT_a^2} \quad (7.104)$$

Ecuația lui Arrhenius (7.86) poate fi scrisă

$$k_1(T) = k_1(T_a) f(\theta) \quad (7.105)$$

unde

$$f(\theta) = \exp\left(\frac{\theta}{1 + \gamma\theta}\right) \quad (7.106)$$

parametrul γ fiind dat de

$$\gamma = \frac{RT_a}{E} \quad (7.107)$$

Pentru majoritatea reacțiilor chimice, energia de activare este mare în comparație cu produsul RT_a , deci $\gamma \ll 1$. Dacă creșterea adimensională de temperatură θ este de ordinul unității, atunci produsul $\gamma\theta \ll 1$ și (7.106) devine

$$f(\theta) \approx e^{\theta} \quad (7.108)$$

În absența reacției chimice, ecuația de bilanț a energiei este

$$V\rho c \frac{d\Delta T}{dt} = -S\chi\Delta T \quad (7.109)$$

Separînd variabilele și integrînd, se obține dependența de timp a creșterii de temperatură

$$\Delta T(t) = \Delta T(0) \exp\left(-\frac{S\chi}{V\rho c} t\right) \quad (7.110)$$

Drept timp caracteristic, alegem timpul Newtonian de răcire,

$$t_N = \frac{c\rho V}{\chi S} \quad (7.111)$$

Acesta reprezintă timpul necesar pentru ca diferența de temperatură între sistem și mediu să scadă de e ori, într-un amestec inert din punct de vedere chimic. Dacă transferul de căldură este lent, timpul caracteristic t_N va fi mare. Timpul adimensional este

$$\tau = \frac{t}{t_N} \quad (7.112)$$

Înlocuim variabilele adimensionale, date de (7.103), (7.104) și (7.112) în prima ecuație de evoluție (7.102). Se obține astfel

$$\frac{d\alpha}{d\tau} = \varepsilon\pi_0 e^{-\varepsilon\tau} - \kappa f(\theta)\alpha \quad (7.113)$$

Parametrii adimensionali care apar în această ecuație sînt

$$\varepsilon = k_0 t_N \quad (7.114)$$

Acest parametru oferă o comparație a timpului caracteristic de descompunere a precursorului cu timpul Newtonian de răcire.

$$\kappa = k_1 (T_a) t_N \quad (7.115)$$

Acest parametru compară scalele de timp pentru producerea pe cale chimică a căldurii și transferul Newtonian al acesteia. Dacă reacția exotermă este rapidă în raport cu pierderea de căldură, κ este mare. Înlocuind (7.103), (7.104) și (7.112) în a doua ecuație de evoluție (7.102), se obține

$$\frac{d\theta}{d\tau} = \alpha f(\theta) - \theta \quad (7.116)$$

Drept concentrație caracteristică, s-a ales

$$c_{\text{ref}} = \frac{\chi S R T_a^2}{E Q V k_1(T_a)}$$

Notăm

$$\mu = \varepsilon \pi = \mu_0 e^{-\varepsilon \tau} \quad (7.117)$$

Cu această notație și în aproximația exponențială (7.108), ecuațiile de evoluție (7.113) și (7.116) devin

$$\begin{cases} \frac{d\alpha}{d\tau} = \mu - \kappa \alpha e^{\theta} \\ \frac{d\theta}{d\tau} = \alpha e^{\theta} - \theta \end{cases} \quad (7.118)$$

Considerăm variabilele adimensionale α și θ ca funcții de concentrația precursorului, μ . Presupunem că ele variază după o scală de timp rapidă în comparație cu consumarea precursorului ($\varepsilon \ll 1$). Aplicăm, în consecință, ipoteza stării pseudostaționare

$$\frac{d\alpha}{d\tau} = \frac{d\theta}{d\tau} = 0 \quad (7.119)$$

Impunând această condiție în (7.118), rezultă

$$\begin{cases} \alpha_{SS} = \frac{\mu}{\kappa} e^{-\mu/\kappa} \\ \theta_{SS} = \frac{\mu}{\kappa} \end{cases} \quad (7.120)$$

Dependența dată de (7.120) este prezentată în fig. 7.9. Pentru a determina dependența de timp a stării pseudostaționare, înlocuim (7.117) în (7.120)

$$\begin{cases} \alpha_{SS} = \frac{\mu_0 e^{-\varepsilon \tau}}{\kappa} \exp\left(-\frac{\mu_0}{\kappa} e^{-\varepsilon \tau}\right) \\ \theta_{SS} = \frac{\mu_0}{\kappa} e^{-\varepsilon \tau} \end{cases} \quad (7.121)$$

Valoarea lui θ_{SS} scade exponențial în timp. Valoarea lui α_{SS} atinge un maxim pentru

$$\tau_{\text{max}} = \frac{1}{\varepsilon} \ln \frac{\mu_0}{\kappa}$$

Fig. 7.10 prezintă variația în timp a stării pseudostaționare, pentru $\mu_0 = 0,5$, $\kappa = 0,05$ și $\varepsilon = 10^{-2}$ [18].

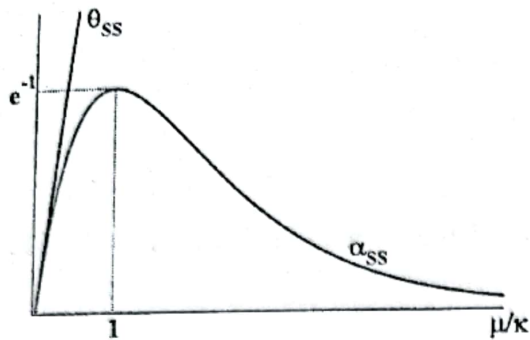


Fig. 7.9

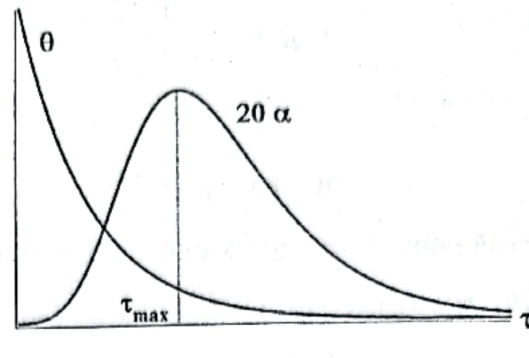


Fig. 7.10

Studiem stabilitatea stării pseudostaționare (7.120). Matricea Jacobiană asociată ecuațiilor de evoluție (7.118), evaluată la starea staționară, este

$$J = \begin{pmatrix} -\kappa e^{\mu/\kappa} & -\mu \\ e^{\mu/\kappa} & \frac{\mu}{\kappa} - 1 \end{pmatrix} \quad (7.122)$$

Trasa matricei Jacobiene este

$$\text{tr}(J) = -\kappa e^{\mu/\kappa} + \frac{\mu}{\kappa} - 1 \quad (7.123)$$

iar determinantul acesteia are expresia

$$\det(J) = \kappa e^{\mu/\kappa} \quad (7.124)$$

Acesta este întotdeauna pozitiv. Bifurcația Hopf se produce dacă $\text{tr}(J)$ se anulează.

Aceasta este o ecuație transcendentă și conduce la ecuațiile parametrice

$$\begin{cases} \kappa^* = (\theta_{SS}^* - 1)e^{-\theta_{SS}^*} \\ \mu^* = \kappa^* \theta_{SS}^* \end{cases} \quad (7.125)$$

Anulînd derivata $d\kappa^*/d\theta_{SS}^*$, se găsește că maximum lui κ^* este e^{-2} și corespunde lui $\theta_{SS}^* = 2$. Ca urmare, sistemul poate prezenta bifurcații Hopf doar pentru $\kappa < e^{-2}$. Din (7.115) rezultă

$$k_1(T_a) < \frac{e^{-2}}{t_N} \quad (7.126)$$

Pentru ca sistemul să prezinte oscilații, producerea de căldură datorită reacției exoterme trebuie să fie lentă în comparație cu transferul termic. Pentru o valoare a

parametrului $\kappa < e^{-2}$, există două puncte de bifurcație Hopf, $\mu_1^* > \mu_2^*$. Starea pseudostaționară va fi instabilă atât timp cât

$$\mu_2^* < \mu < \mu_1^* \quad (7.127)$$

Considerăm că valoarea inițială a lui μ_0 este mai mare decât punctul superior de bifurcație, μ_1^* . Există o perioadă preoscilatorie, pe durata căreia μ atinge valoarea μ_1^*

$$\tau_1^* = \frac{1}{\varepsilon} \ln \frac{\mu_0}{\mu_1^*} \quad (7.128)$$

Sistemul va începe în acest moment să oscileze. Oscilațiile durează pînă cînd este atins punctul inferior de bifurcație, μ_2^* , la momentul

$$\tau_2^* = \frac{1}{\varepsilon} \ln \frac{\mu_0}{\mu_2^*} \quad (7.129)$$

După aceasta, sistemul revine la starea staționară. Fig. 7.11 a și b prezintă evoluția în timp a stării pseudostaționare prezisă de (7.121) (linie întreruptă) și evoluția obținută prin integrare numerică a ecuațiilor adimensionale de evoluție (7.118) (linie continuă).

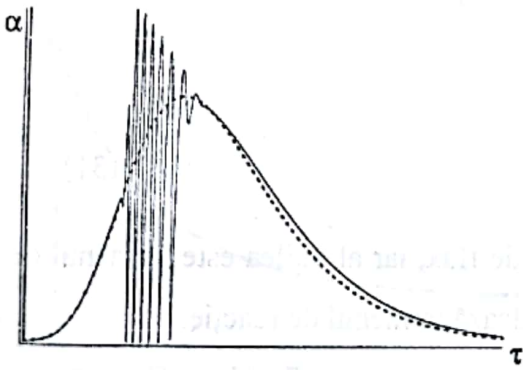


Fig. 7.11 a

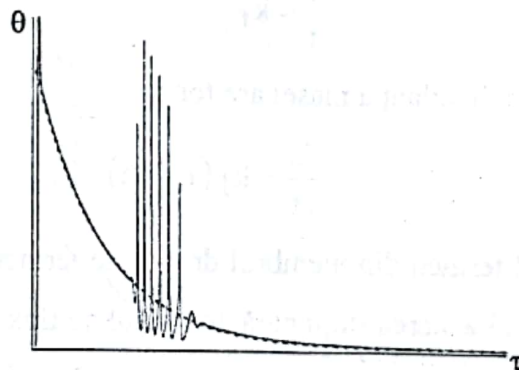


Fig. 7.11 b

7.8. Autocataliză în sisteme deschise cu agitare perfectă

Există sisteme experimentale care permit menținerea departe de echilibrul termodinamic un timp indefinit. Unul dintre aceste sisteme este reactorul cu alimentare continuă și agitare perfectă, cunoscut în literatură sub numele de '*Continuous Flow Stirred Tank Reactor*' (CSTR). Considerăm că, într-un astfel de sistem, are loc reacția de ordinul I [18]



Determinăm concentrația lui A în reactor ca funcție de timp, pentru anumite valori ale parametrilor de control (concentrații de intrare în reactor, flux de intrare). Concentrația lui A în reactor se modifică datorită reacției chimice și schimbului de substanță cu mediul. Presupunem că reactorul este alimentat cu fluxul volumic J, concentrația de intrare fiind a_0 . Volumul reactorului fiind V, timpul mediu de staționare în reactor, numit și timp de rezidență, este

$$\frac{V}{J} = \tau$$

Inversul acestuia este constanta de flux

$$\frac{1}{\tau} = k_f$$

Ecuatia de bilanț a masei are forma

$$\frac{da}{dt} = k_f(a_0 - a) - k_1 a \quad (7.131)$$

Primul termen din membrul drept este termenul de flux, iar al doilea este termenul de reacție. La starea staționară, termenul de flux egalează termenul de reacție.

Căutăm soluția ecuației diferențiale neomogene (7.131). Considerăm concentrația inițială în reactor egală cu concentrația de intrare în reactor

$$a(t = 0) = a_0 \quad (7.132)$$

Ecuatiei neomogene (7.131) îi corespunde ecuația omogenă

$$\frac{da}{dt} = -(k_f + k_1)a \quad (7.133)$$

Soluțiile acesteia sînt de forma

$$a = c \exp[-(k_f + k_1)t]$$

Soluția generală a ecuației neomogene (7.131) este de forma

$$a = c_1 + c_2 \exp[-(k_f + k_1)t] \quad (7.134)$$

Ținând cont de condiția inițială (7.132) și impunând condiția ca (7.134) să fie soluție a ecuației (7.131), se obține că

$$a(t) = \frac{k_f a_0 + k_1 a_0 \exp[-(k_f + k_1)t]}{k_f + k_1} \quad (7.135)$$

În conformitate cu (7.135), concentrația lui A scade exponențial în timp (fig. 7.12), tinzând asimptotic la

$$a_{SS} = \frac{k_f a_0}{k_f + k_1} < a_0 \quad (7.136)$$

La starea staționară, viteza de reacție nu este zero ci $k_1 a_{SS}$ și este egală cu termenul de flux, $k_f(a_0 - a_{SS})$. Concentrația lui A la starea staționară depinde de concentrația de intrare a_0 , constanta de viteză k_1 și constanta de flux k_f . În experiment, cel mai ușor se modifică constanta de flux, deci timpul de staționare în reactor. Din (7.136) rezultă că

$$a_{SS} = \frac{a_0}{1 + k_1 \tau} \quad (7.137)$$

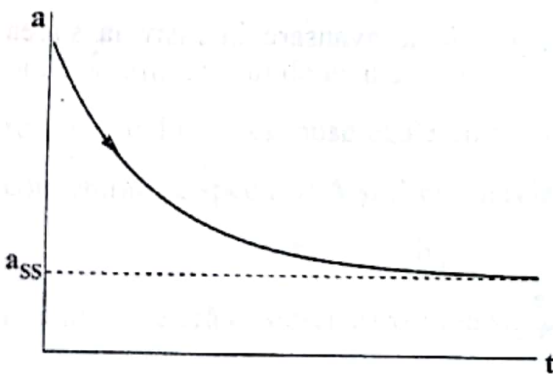


Fig. 7.12

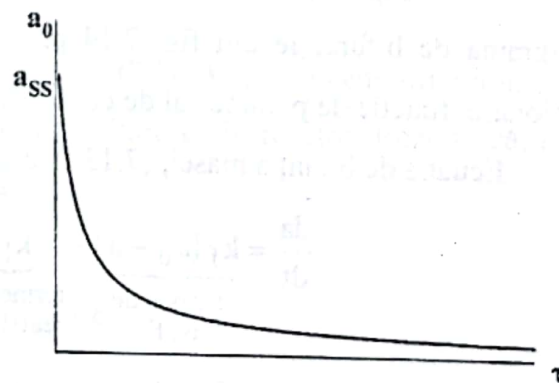


Fig. 7.13

Dependența concentrației în reactor la starea staționară funcție de timpul de staționare în reactor este prezentată în fig. 7.13. La fluxuri mici de intrare (timpuri de staționare mari), A poate fi convertit complet în B în reactor, iar sistemul se apropie de starea de echilibru ($a_{SS} \rightarrow 0$). La fluxuri de intrare mari, timpul de staționare este foarte mic, iar moleculele de reactant nu au la dispoziție mult timp pentru a reacționa. Gradul de

avansare ia valori mici și $a_{SS} \rightarrow a_0$. Pentru o valoare dată a fluxului de intrare, există o singură stare staționară: spunem că sistemul este monostabil.

Concentrația lui A la starea staționară poate fi scrisă ca

$$a_{SS} = a_0 - \hat{x}_{SS} \Rightarrow \hat{x}_{SS} = a_0 - a_{SS} \quad (7.138)$$

unde $\hat{x}_{SS}$ este gradul de avansare intensiv al reacției, la starea staționară. Dacă $\hat{x}_{SS} = 0$ înseamnă că nu există conversie a lui A în B, iar $\hat{x}_{SS} = a_0$ înseamnă conversie completă. Din (7.137) și (7.138), rezultă că

$$\hat{x}_{SS} = \frac{k_1 \tau a_0}{1 + k_1 \tau} \quad (7.139)$$

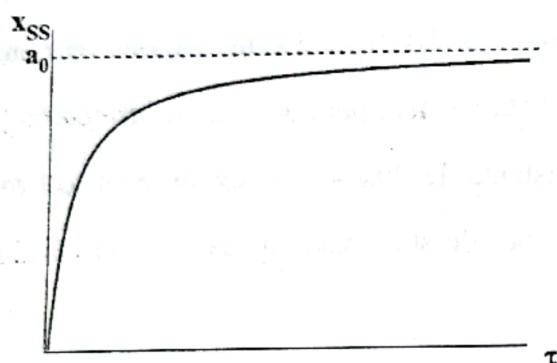


Fig. 7.14

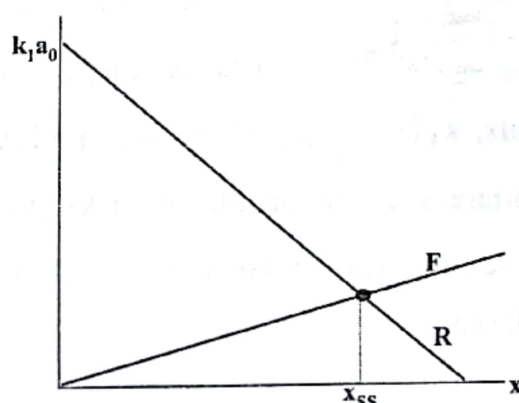


Fig. 7.15

Diagrama de bifurcație din fig. 7.14 prezintă gradul de avansare intensiv la starea staționară, funcție de parametrul de control τ .

Ecuatia de bilanț a masei, (7.131), este

$$\frac{da}{dt} = \underbrace{k_f(a_0 - a)}_{\text{termen de flux, F}} - \underbrace{k_1 a}_{\text{termen de reacție, R}}$$

Aceasta poate fi exprimată funcție de gradul de avansare intensiv

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \underbrace{k_1(a_0 - \hat{x})}_R - \underbrace{k_f \hat{x}}_F \quad (7.140)$$

Cei doi termeni, de reacție și de flux, sînt reprezentați în diagrama de flux din fig. 7.15, funcție de gradul de avansare a reacției

$$\begin{cases} F = k_f \hat{x} \\ R = k_1(a_0 - \hat{x}) \end{cases} \quad (7.141)$$

Dreapta de reacție are valoare maximă în $\hat{x} = 0$ și valoare minimă pentru $\hat{x} = a_0$.

Linia de flux este zero pentru $\hat{x} = 0$, când fluxul de intrare și cel de ieșire au aceeași compoziție. Panta liniei de flux este mare când timpii de staționare în reactor sînt mici. Intersecția celor două drepte dă starea staționară a sistemului.

Diagrama de flux permite o analiză calitativă a stabilității. Considerăm sistemul la starea staționară. Dacă, în urma unei perturbații, $\hat{x}$ crește, atunci R devine mai mic ca F , deci $d\hat{x}/dt < 0$, ceea ce readuce sistemul la starea staționară. Dacă $\hat{x}$ scade, atunci $d\hat{x}/dt > 0$ și sistemul revine, de asemenea, la starea staționară. Rezultă că, în cazul unei transformări chimice simple, de tipul (7.130), care are loc în CSTR, sistemul posedă o singură stare staționară, care este stabilă.

Bistabilitate în reactoare cu alimentare continuă și agitare perfectă

Considerăm că în CSTR se produce un proces autocatalitic trimolecular [18]



Concentrațiile la intrarea în reactor sînt a_0 și b_0 . Concentrațiile în reactor la un moment oarecare de timp sînt

$$\begin{cases} a = a_0 - \hat{x} \\ b = b_0 + \hat{x} \end{cases} \quad (7.143)$$

unde $\hat{x}$ este gradul de avansare intensiv a reacției (7.142), iar concentrațiile inițiale în reactor au fost presupuse egale cu valorile lor la intrarea în reactor. Rezultă că, între concentrațiile speciilor A și B există relația

$$b = a_0 + b_0 - a$$

Ecuația cinetică ce descrie evoluția sistemului este

$$\frac{da}{dt} = k_f(a_0 - a) - k_1 a(a_0 + b_0 - a)^2 \quad (7.144)$$

Înlocuind (7.143) în (7.144), se obține

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \underbrace{k_1(a_0 - \hat{x})(b_0 + \hat{x})^2}_R - \underbrace{k_f\hat{x}}_F \quad (7.145)$$

Termenul de reacție din (7.145) depinde de constanta de viteză k_1 și de concentrațiile de intrare, a_0 și b_0 . Curba de reacție este zero la conversie completă ($\hat{x} = a_0$) și are

valori mici pentru $\hat{x} = 0$ (fig. 7.16). Termenul de flux depinde de constanta de flux k_f . În funcție de valoarea lui k_f , sînt posibile situațiile

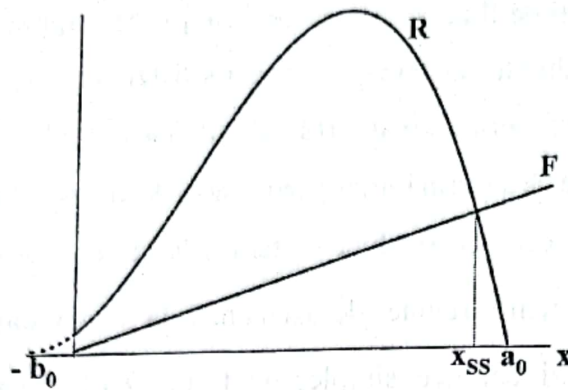


Fig. 7.16

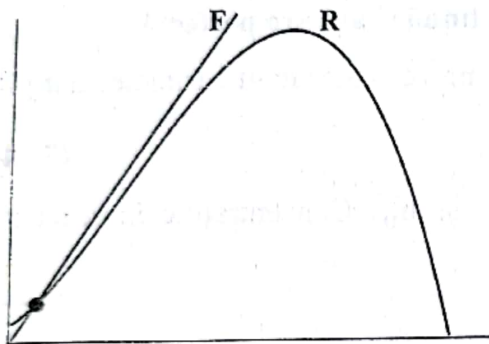


Fig. 7.17 a

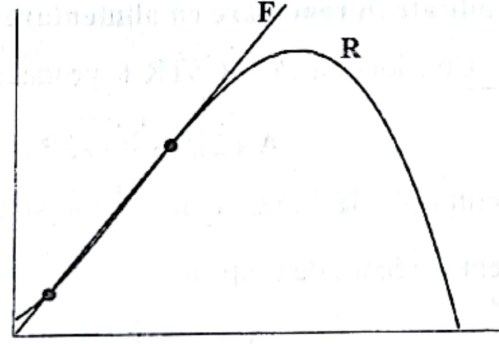


Fig. 7.17 b

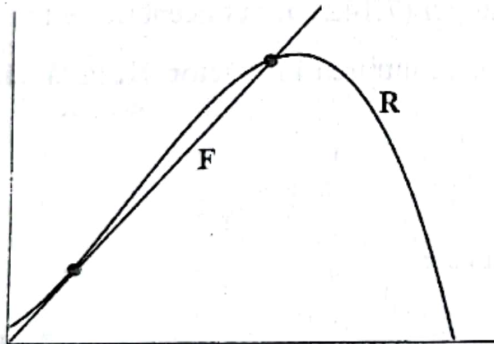


Fig. 7.17 c

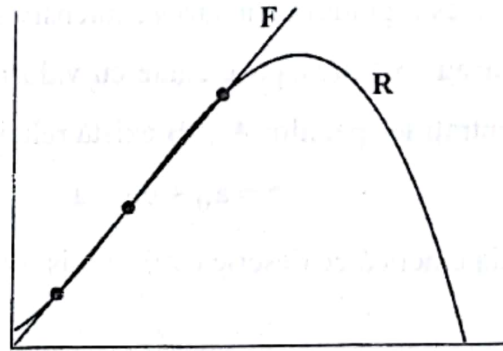


Fig. 7.17 d

- Pentru timpi de staționare mici, R și F au un singur punct de intersecție, la grade de avansare mici. Sistemul posedă o singură stare staționară (fig. 7.17 a).
- În afara stării staționare precedente, mai există un punct în care dreapta de flux este tangentă la curba de reacție, la grade de avansare mari (fig. 7.17b).
- Există un punct de intersecție la grade de avansare mari. În afara acestuia, R și F

- sînt tangente pentru un grad de avansare mic (fig. 7.17 c).
- d) R și F au trei puncte de intersecție. Sistemul posedă stări staționare multiple, proces numit multistabilitate (fig. 7.17 d). Timpul de staționare are o valoare intermediară între valorile corespunzătoare fig. 7.17 b și fig. 7.17 c.
- e) Pentru valori ale lui k_f mai mici decît în fig. 7.17 c, există o singură stare staționară, la valori mari ale gradului de avansare (fig. 7.16).
- Reprezentînd gradul de avansare la starea staționară funcție de parametrul de control k_f , se obține diagrama de bifurcație din fig. 7.18.

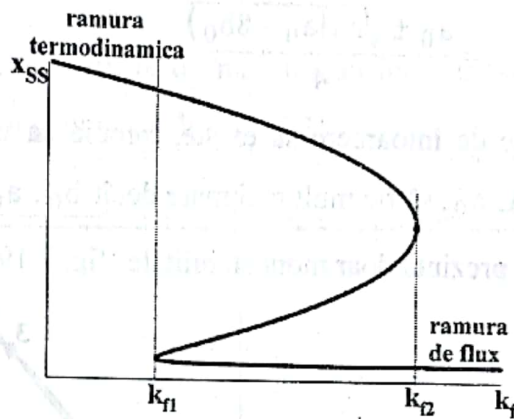


Fig. 7.18

Sistemul prezintă un comportament histeretic. Pentru o constantă de flux $k_{f1} < k_f < k_{f2}$, sistemul are stări staționare multiple. În k_{f1} și k_{f2} au loc bifurcații nod-șea. Din fig. 7.18 se observă că, în k_{f1} și k_{f2} , graficul $\hat{x}_{SS}(k_f)$ admite puncte de întoarcere. Spunem că, în $k_f = k_{f1}$ există o tangentă de amorsare a reacției [18]: scăzînd k_f , în acest punct are loc un salt de la grade de avansare mici (ramura inferioară a diagramei) la grade de avansare mari (ramura superioară). În $k_f = k_{f2}$ există o tangentă de extincție a reacției: la creșterea lui k_f , în acest punct are loc un salt de la grade de avansare mari (ramura superioară) la grade de avansare mici (ramura inferioară).

Amorsarea și extincția corespund situației în care dreapta de flux F este tangentă la curba de reacție R (fig. 7.17 b și c). Matematic, această condiție implică

$$\begin{cases} R = F \\ \frac{dR}{d\hat{x}} = \frac{dF}{d\hat{x}} \end{cases} \quad (7.146)$$

unde, în acord cu (7.145),

$$R = k_1(a_0 - \hat{x})(b_0 + \hat{x})^2; F = k_f \hat{x} \quad (7.147)$$

Înlocuind (7.147) în (7.146), se obține sistemul

$$\begin{cases} k_1(a_0 - \hat{x})(b_0 + \hat{x})^2 = k_f \hat{x} \\ k_1(b_0 + \hat{x})(2a_0 - b_0 - 3\hat{x}) = k_f \end{cases} \quad (7.148)$$

Făcînd raportul acestor ecuații, se obține că gradul de avansare la starea staționară, în punctele de întoarcere, satisface $2\hat{x}^2 - a_0\hat{x} + a_0b_0 = 0$. Această ecuație are rădăcinile

$$\hat{x}_{1,2} = \frac{a_0 \pm \sqrt{a_0(a_0 - 8b_0)}}{4}$$

Pentru ca aceste puncte de întoarcere să existe, trebuie ca valoarea concentrației de intrare în reactor a lui A, a_0 , să fie mult mai mare decît b_0 , $a_0 > 8b_0$.

În caz contrar, sistemul prezintă doar monostabilitate (fig. 7.19).

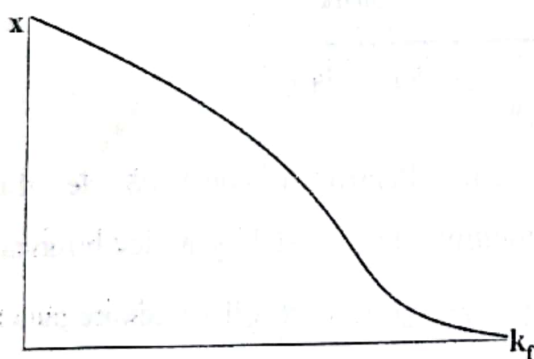


Fig. 7.19

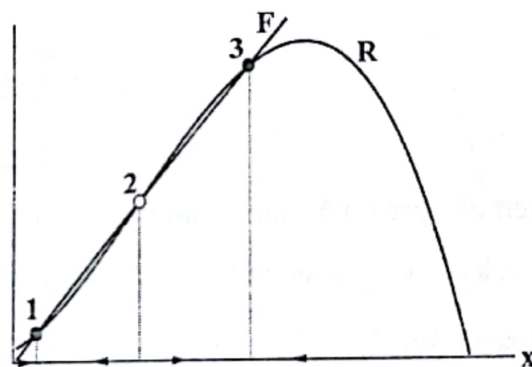


Fig. 7.20

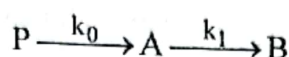
Cu ajutorul diagramei de flux, poate fi discutată stabilitatea stărilor staționare (fig. 7.20). În conformitate cu (7.145), ecuația de evoluție a gradului de avansare are forma

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = R - F \quad (7.149)$$

Dacă sistemul se află la stînga stării staționare 1, $R > F \Rightarrow d\hat{x}/dt > 0$ și gradul de avansare crește. Între stările staționare 1 și 2, $R < F \Rightarrow d\hat{x}/dt < 0$. Între stările staționare 2 și 3, $R > F \Rightarrow d\hat{x}/dt > 0$. La dreapta stării staționare 3, $R < F \Rightarrow d\hat{x}/dt < 0$. Rezultă că stările staționare 1 și 3 sînt stabile, iar starea intermediară, 2, este instabilă. Sistemul are o dinamică bistabilă.

7.9. Formarea structurilor Turing în sisteme chimice

Considerăm oscilatorul termocinetic, descris de transformările (7.85) [18]



Ecuatiile de evoluție într-un sistem cu agitare perfectă sînt date de (7.99) și (7.102)

$$\begin{cases} \frac{dp}{dt} = -k_0 p \\ \frac{da}{dt} = k_0 p - k_1(T)a \\ V\rho c \frac{dT}{dt} = QV k_1(T)a - S\chi(T - T_a) \end{cases} \quad (7.150)$$

Considerăm acum că transformările de mai sus au loc într-un sistem neuniform din punct de vedere spațial, cu geometria din fig. 7.21.

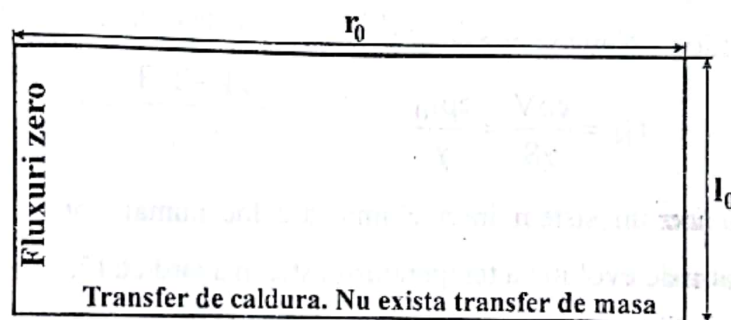


Fig. 7.21

Capetele reactorului sînt izolate și corespund unor condiții cu flux nul la frontieră. De-a lungul frontierelor superioară și inferioară, nu există transfer de masă, dar căldura poate fi pierdută prin răcire Newtoniană. Considerăm că difuzia și conducția au loc de-a lungul unei singure direcții spațiale, r . Pentru sistemul extins spațial, ecuațiile de evoluție (7.150) devin

$$\begin{cases} \frac{\partial p}{\partial t} = D_P \frac{\partial^2 p}{\partial r^2} - k_0 p \\ \frac{\partial a}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 a}{\partial r^2} + k_0 p - k_1(T)a \\ \rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + Q k_1(T)a - \frac{\chi}{l_0} (T - T_a) \end{cases} \quad (7.151)$$

unde D_P și D_A sînt coeficienții de difuzie pentru precursor, respectiv intermediarul A, iar κ este coeficientul de conductibilitate termică. Condițiile la frontieră sînt de forma

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{\partial a}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0, \quad r = 0, r = r_0, \quad t \geq 0 \quad (7.152)$$

Presupunem că distribuția inițială a precursorului este uniformă

$$p(r, t = 0) = p_0 \quad 0 \leq r \leq r_0$$

Ca urmare, p va rămîne uniform spațial la orice moment ulterior și va fi

$$p = p_0 e^{-k_0 t} \quad (7.153)$$

Trecem la variabile adimensionale. Pentru aceasta, determinăm întîi timpii caracteristici ai proceselor care au loc în sistem. În acord cu (7.111), timpul caracteristic al răcirii Newtoniene este

$$t_N = \frac{c\rho V}{\chi S} = \frac{c\rho l_0}{\chi} \quad (7.154)$$

Presupunem că într-un sistem inert chimic are loc numai transfer de căldură, prin conducție. Ecuația de evoluție a temperaturii este, în acord cu (7.151)

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial r^2}$$

Ca urmare, timpul caracteristic al conducției termice este

$$t_F = \frac{\rho c r_0^2}{\kappa} \quad (7.155)$$

Presupunem că în sistem are loc numai difuzia intermediarului A. Concentrația acestuia se schimbă conform legii lui Fick

$$\frac{\partial a}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 a}{\partial r^2}$$

Timpul caracteristic al procesului de difuzie este

$$t_D = \frac{r_0^2}{D_A} \quad (7.156)$$

Adimensionalizăm timpul luînd drept timp caracteristic timpul răcirii prin conducție

$$\tau = \frac{t}{t_F} \quad (7.157)$$

Coordonata spațială adimensională este

$$x = \frac{r}{r_0}; \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (7.158)$$

Concentrațiile adimensionale sînt

$$\alpha = \frac{a}{c_0}; \quad \pi = \frac{p}{c_0} \quad (7.159)$$

unde c_0 este o concentrație de referință

$$c_0 = \frac{RT_a^2}{Qk_1(T_a)E} \chi \quad (7.160)$$

Temperatura adimensională este dată de (7.104)

$$\theta = \frac{E(T - T_a)}{RT_a^2}$$

Notăm

$$\begin{cases} \varepsilon = k_0 t_F \\ \mu_0 = \frac{\varepsilon \pi_0}{\gamma} = k_0 t_N \pi_0 \end{cases} \quad (7.161)$$

Ca urmare, dependența de timp a concentrației precursorului, (7.153), devine

$$\mu = \mu_0 e^{-\varepsilon \tau} \quad (7.162)$$

Cu (7.157)-(7.160) și (7.104)-(7.108), ultimele două ecuații de evoluție din (7.151) devin [18]

$$\begin{cases} \frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = \beta \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} + \gamma (\mu - k \alpha e^{\theta}) \\ \frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \gamma (\alpha e^{\theta} - \theta) \end{cases} \quad (7.163)$$

unde

$$\beta = \frac{t_F}{t_D} = \frac{D_A t_F}{r_0^2} \quad (7.164)$$

este raportul timpilor caracteristici ai conducției termice și difuziei, iar

$$\gamma = \frac{t_F}{t_N} = \frac{\chi r_0^2}{\kappa l_0} \quad (7.165)$$

este raportul timpilor caracteristici ai transferului termic. Acesta crește cu pătratul lungimii zonei de reacție. De asemenea, am notat

$$k = k_1(T_a)t_N \quad (7.166)$$

Condițiile la frontieră, în variabile adimensionale, au forma

$$\frac{\partial \alpha}{\partial x} = \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0 \quad x = 0, 1 \quad \tau \geq 0 \quad (7.167)$$

Impunem condiția de staționaritate în (7.163). Aceasta conduce la

$$\begin{cases} \beta \frac{\partial^2 \alpha}{\partial x^2} + \gamma(\mu - k\alpha e^\theta) = 0 \\ \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \gamma(\alpha e^\theta - \theta) = 0 \end{cases} \quad (7.168)$$

Plecînd de la sistemul inițial, (7.151), în care apar doisprezece parametri, s-a ajuns la (7.168), cu trei parametri. Sistemul (7.168) admite o soluție uniformă spațial, $(\alpha_{SS}, \theta_{SS})$, dată de (7.120). Ne interesează dacă acesta poate deveni instabilă în raport cu perturbații uniforme spațial. Considerăm soluția perturbată de forma [18]

$$\begin{cases} \alpha(\tau, x) = \alpha_{SS} + \Delta\alpha = \alpha_{SS} + \sum_{n=0}^{\infty} A_n(\tau) \cos(n\pi x) \\ \theta(\tau, x) = \theta_{SS} + \Delta\theta = \theta_{SS} + \sum_{n=0}^{\infty} T_n(\tau) \cos(n\pi x) \end{cases} \quad (7.169)$$

Perturbațiile au o amplitudine dependentă de timp și termeni spațiali care satisfac condițiile la frontieră (7.167). Sînt posibile următoarele situații

- starea staționară uniformă spațial, $(\alpha_{SS}, \theta_{SS})$, este stabilă. Toți coeficienții dependenți de timp vor tinde asimptotic la zero.
- starea staționară este stabilă în raport cu difuzia, dar sistemul prezintă o rupere de simetrie temporală. Coeficienții A_0 și T_0 vor crește, iar celelalte amplitudini vor tinde la zero. Sistemul prezintă oscilații periodice de tip ciclu limită, omogene spațial. Comportarea este cea a sistemului cu agitare perfectă.
- starea staționară este instabilă în raport cu perturbațiile neuniforme spațial. Cel puțin unii dintre coeficienții A_n și T_n de ordin superior vor crește. În sistem vor apărea

structuri spațiale (după un tranzient, A_n și T_n rămân constante în timp) sau structuri spațiotemporale (A_n și T_n sînt funcții de timp). Înlocuim soluția perturbată (7.169) în ecuațiile de evoluție (7.163). Ținînd cont de condiția de staționaritate (7.168) și de proprietățile de ortogonalitate ale funcțiilor armonice, în aproximația micilor perturbații, se obțin ecuațiile de evoluție pentru amplitudinile diverselor moduri din (7.169)

$$\begin{cases} \frac{dA_n}{d\tau} = -(\gamma k e^{\mu/k} + \beta n^2 \pi^2) A_n - \gamma \mu T_n \\ \frac{dT_n}{d\tau} = \gamma e^{\mu/k} A_n + \left[\gamma \left(\frac{\mu}{k} - 1 \right) - n^2 \pi^2 \right] T_n \end{cases} \quad (7.170)$$

Sistemul ecuațiilor liniare de evoluție (7.170) admite soluții de forma

$$\begin{cases} A_n = c_1 \exp(\omega_n \tau) \\ T_n = c_2 \exp(\omega_n \tau) \end{cases} \quad (7.171)$$

Valorile proprii ω_n asociate sistemului (7.170) sînt rădăcini ale ecuației

$$\omega_n^2 - \omega_n \text{Tr}(J) + \det(J) = 0 \quad (7.172)$$

unde matricea Jacobiană asociată sistemului (7.170) este

$$J = \begin{pmatrix} -\gamma k e^{\mu/k} - \beta n^2 \pi^2 & -\gamma \mu \\ \gamma e^{\mu/k} & \gamma \left(\frac{\mu}{k} - 1 \right) - n^2 \pi^2 \end{pmatrix} \quad (7.173)$$

Trasa și determinantul acesteia sînt

$$\begin{cases} \text{Tr}(J) = \gamma \left(\frac{\mu}{k} - 1 - k e^{\mu/k} \right) - (1 + \beta) n^2 \pi^2 \\ \det(J) = \gamma^2 k e^{\mu/k} + \gamma \left[k e^{\mu/k} - \beta \left(\frac{\mu}{k} - 1 \right) \right] n^2 \pi^2 + \beta n^4 \pi^4 \end{cases} \quad (7.174)$$

Pentru dinamica sistemului, prezintă importanță situațiile:

- $\text{Tr}(J) = 0$, $\det(J) > 0$ - aceasta este condiția de apariție a bifurcației Hopf și corespunde apariției ordinii temporale (doar A_0 și T_0 sînt nenule) sau spațiotemporale.
- $\det(J) = 0$, reprezintă condiția de apariție a ordinii spațiale. Dacă parametrul β este mai mare decît o valoare critică

$$\beta > \beta_C = \frac{k + \mu + 2(k\mu)^{1/2}}{(\mu/k - 1)^2} e^{\mu/k} \quad (7.175)$$

atunci a doua ecuație din (7.174) admite două rădăcini reale

$$n_{\pm}^2 = \frac{\beta\left(\frac{\mu}{k} - 1\right) - ke^{\frac{\mu}{k}} \pm \left\{ \left[\beta\left(\frac{\mu}{k} - 1\right) - ke^{\frac{\mu}{k}} \right]^2 - 4\beta ke^{\frac{\mu}{k}} \right\}^{1/2}}{2\pi^2 \frac{\beta}{\gamma}} \quad (7.176)$$

Parametrul β este raportul timpilor caracteristici ai conducției termice și difuziei. În conformitate cu (7.175), ordinea spațială se produce dacă $t_F \gg t_D$, adică dacă difuzia se realizează mai rapid decât transferul termic prin conducție. În termeni ai sistemelor de tip activator-inhibitor, prezentate în paragraful 7.5, temperatura este în acest caz activatorul, iar specia intermediară A este inhibitorul. Condiția de mai sus reprezintă o constrângere care trebuie satisfăcută în orice sistem chimic pentru apariția structurilor spațiale: inhibitorul trebuie să difuzeze mai rapid decât activatorul [22]. În cazul sistemelor cu reacție-difuzie în care atât activatorul cât și inhibitorul sînt specii chimice, această condiție necesită ca inhibitorul să aibă un coeficient de difuzie mult mai mare decât activatorul. Deoarece într-un sistem chimic acestea sînt specii chimice asemănătoare, condiția dată este, în general, dificil de satisfăcut.

Starea staționară uniformă spațial este instabilă la perturbații cu ordinul n în domeniul

$$n_- \leq n \leq n_+ \quad (7.177)$$

Dacă, de exemplu, modul cu $n=4$ este instabil, distribuția concentrației și temperaturii în reactor au forma din fig. 7.22. Deoarece n_+^2 trebuie să fie supraunitar pentru apariția instabilității, rezultă că trebuie satisfăcută condiția

$$\gamma > \gamma_C = \frac{2\pi^2\beta}{\beta\left(\frac{\mu}{k} - 1\right) - ke^{\frac{\mu}{k}} + \left\{ \left[\beta\left(\frac{\mu}{k} - 1\right) - ke^{\frac{\mu}{k}} \right]^2 - 4\beta ke^{\frac{\mu}{k}} \right\}^{1/2}}$$

Apariția structurilor spațiale este favorizată de existența zonelor întinse de reacție (γ mare). Cu creșterea lui γ , mai multe moduri pot fi excitate [18].

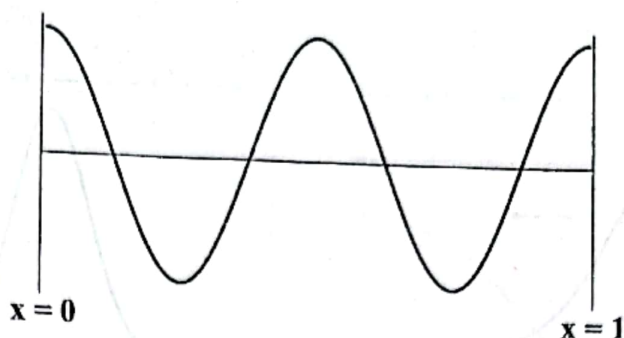


Fig. 7.22

În situația în care mai multe moduri se află simultan în intervalul de instabilitate (7.177), structura spațială este mai complexă. În sistemul considerat, parametrul μ nu este constant, deoarece precursorul se descompune lent în timp. Din acest motiv, este posibil ca, în timp, moduri cu ordin diferit să devină succesiv instabile, iar modurile care au fost instabile să se stabilizeze.

7.10. Unde călătoare în sisteme chimice

Considerăm o altă formă a comportării spațiale. Un tub lung conține reactanți, inițial uniform distribuiți. Reacția spontană care convertește reactanții în produși este foarte lentă, dar poate fi inițiată la un capăt prin adăugarea unor intermediari (cum ar fi un autocatalizator), sau prin încălzire locală. Ne interesează în ce condiții reacția se poate propaga de-a lungul tubului. Dacă reactanții sînt gazoși și procesul este exoterm, zona de reacție se va deplasa rapid, și vorbim despre propagarea flăcării. Pentru reacții în soluții diluate, propagarea este de obicei mult mai lentă, și spunem că în sistem apare o *undă chimică*. Se disting trei tipuri de unde: fronturi, pulsuri și trenuri de unde [18].

- Frontul* convertește reactanții în produși. Compoziția în fața și în spatele frontului este diferită (fig. 7.23 a).
- În cazul *pulsului*, anumiți intermediari pot fi produși de primul front, dar aceștia sînt convertiți înapoi (sau în alți produși) de al doilea front (numit undă de refacere). Concentrația intermediarului va fi aceeași în fața și în spatele pulsului (fig. 7.23 b).

c. *Trenurile de unde* sînt compuse dintr-o serie de fronturi sau pulsuri, care se succed continuu de-a lungul tubului, fiind inițiate într-un anumit punct, numit centru (fig. 7.23 c).

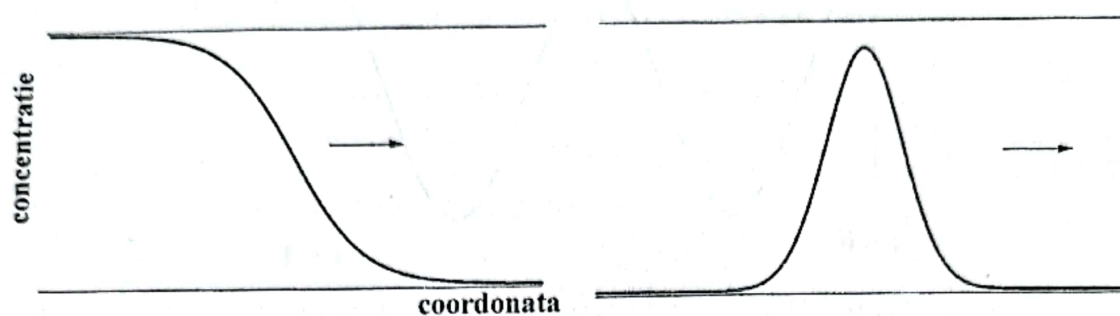


Fig. 7.23 a

Fig. 7.23 b

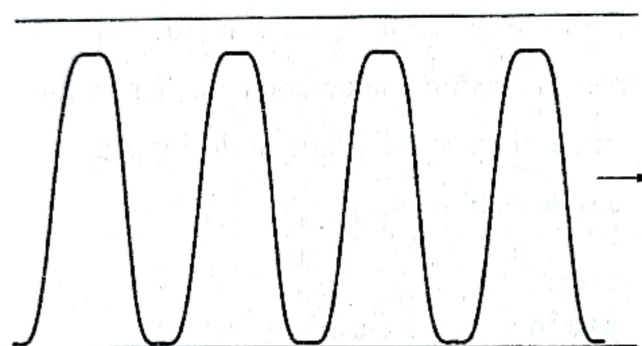
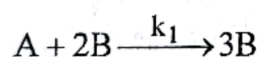


Fig. 7.23 c

Considerăm procesul autocatalitic [18]



Considerăm că inițial tubul conține doar specia A, încît $b = 0$, iar viteza de reacție este peste tot zero. Inițierea este realizată prin adăugarea lui B, local (fig. 7.24 a). În regiunea de inițiere, începe să se producă reacția. Pe măsură ce concentrația autocatalizatorului B crește, acesta începe să difuzeze în reactantul proaspăt și continuă inițierea reacției (fig. 7.24 b).

În spatele frontului ce difuzează, întreaga cantitate de reactant este consumată, rămînînd o regiune cu produsul B. În cele din urmă, aceste procese de reacție și difuzie conduc la un front care se mișcă spre regiunea cu reactant, cu viteză constantă (fig. 7.24 c).

Considerăm un tub subțire de lungime infinită ($-\infty < l < \infty$), de-a lungul căruia concentrația lui A și B variază. Pereții laterali ai tubului nu permit transferul de masă,

încît nu vor exista gradienti de concentrație de-a lungul axei 1, deci unda va fi unidimensională. Pentru reactantul A, ecuația de evoluție este [18]

$$\frac{\partial a}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 a}{\partial r^2} - k_1 a b^2 \quad (7.178)$$

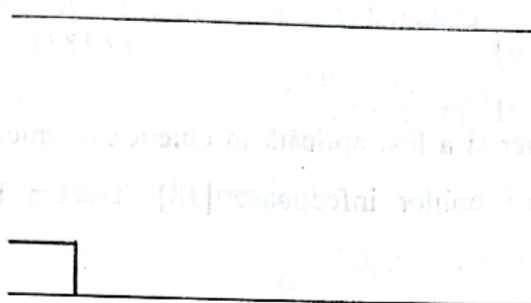


Fig. 7.24 a

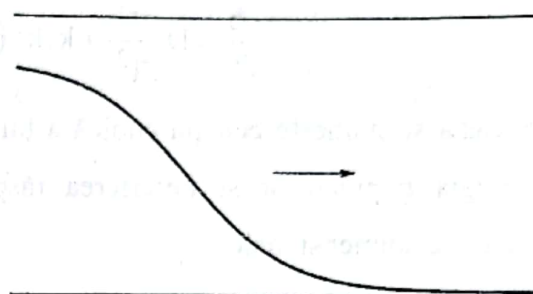


Fig. 7.24 b

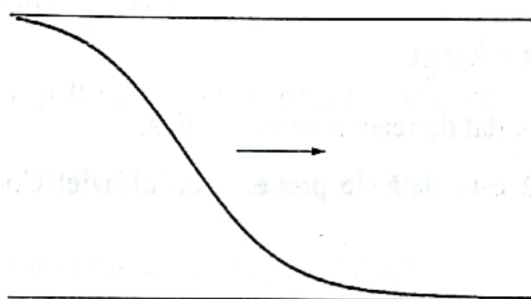


Fig. 7.24 c

Pentru autocatalizator, ecuația este

$$\frac{\partial b}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 b}{\partial r^2} + k_1 a b^2 \quad (7.179)$$

unde r este coordonata de-a lungul zonei de reacție. Condițiile la frontieră sînt următoarele:

- la un capăt al tubului nu a avut loc reacția, deci

$$a = a_0; b = 0, \quad r \rightarrow \infty$$

- la celălalt capăt, reacția este completă

$$a = 0, b = a_0, \quad r \rightarrow -\infty$$

Presupunem că A și B sînt specii chimice similare, cu aceeași valoare a coeficienților de difuzie ($D_A = D_B = D$). Concentrațiile a și b sînt

$$\begin{cases} a = a_0 - \hat{x} \\ b = \hat{x} \end{cases} \quad (7.180)$$

unde $\hat{x}(r, t)$ este gradul de avansare intensiv local al reacției. Ca urmare, concentrațiile a și b satisfac ecuația stoechiometrică

$$a + b = a_0 \quad \forall r, t > 0 \quad (7.181)$$

Înlocuind (7.181) în (7.179), rezultă

$$\frac{\partial b}{\partial t} = D \frac{\partial^2 b}{\partial l^2} + k_1 b^2 (a_0 - b) \quad (7.182)$$

Aceasta se numește ecuația cubică a lui Fisher și a fost aplicată în cinetica chimică, biologia populațiilor și descrierea răspândirii bolilor infecțioase [18]. Trecem la variabile adimensionale.

- concentrația adimensională este $\beta = \frac{b}{a_0}$ (7.183)

- timpul adimensional $\tau = k_1 a_0^2 t$ (7.184)

Timpul caracteristic este dat de reacția autocatalitică.

- distanța caracteristică este dată de procesul de difuzie. Coordonata adimensională este

$$x = \left(\frac{k_1 a_0^2}{D} \right)^{1/2} r \quad (7.185)$$

Înlocuind (7.183)-(7.185) în ecuația de evoluție Cu acestea, ecuația de evoluție adimensională este

$$\frac{\partial \beta}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \beta}{\partial x^2} + \beta^2 (1 - \beta) \quad (7.186)$$

cu condițiile la frontieră

$$\beta = \begin{cases} 1, & x \rightarrow -\infty \\ 0, & x \rightarrow \infty \end{cases} \quad (7.187)$$

Această ecuație, (7.186), admite soluții de tip undă călătoare. Notăm $c = dx/d\tau$ viteza (constantă) a undei. O tehnică utilă în cazul în care apare o propagare cu viteză constantă este trecerea de la un sistem fix de coordonate la unul mobil: originea se deplasează de la stînga la dreapta, împreună cu frontul, cu aceeași viteză constantă c . În acest nou sistem de referință, frontul de reacție apare staționar. Noua variabilă este

$$z = x - ct \quad (7.188)$$

Derivatele devin

$$\frac{\partial \beta}{\partial \tau} = -c \frac{d\beta}{dz}; \frac{\partial^2 \beta}{\partial x^2} = \frac{d^2 \beta}{dz^2} \quad (7.189)$$

Înlocuind (7.189) în (7.186), rezultă

$$\frac{d^2 \beta}{dz^2} + c \frac{d\beta}{dz} + \beta^2(1 - \beta) = 0 \quad (7.190)$$

cu condițiile la frontieră

$$\beta = \begin{cases} 0, & z \rightarrow \infty \\ 1, & z \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (7.191)$$

Gradientul de concentrație $\frac{d\beta}{dz}$ trebuie să tindă la zero la extremitățile tubului. Între extremități, pentru z finit și $0 < \beta < 1$, gradientul de concentrație este negativ

$$\frac{d\beta}{dz} = 0, \beta = 0, 1; \quad \frac{d\beta}{dz} < 0, 0 < \beta < 1 \quad (7.192)$$

Cea mai simplă funcție care satisface condițiile (7.192) este de forma

$$\frac{d\beta}{dz} = -k\beta(1 - \beta) \quad (7.193)$$

unde k este o constantă ce trebuie determinată. Derivând (7.193) în raport cu z , se obține

$$\frac{d^2 \beta}{dz^2} = -k(1 - 2\beta) \frac{d\beta}{dz} = k^2 \beta(1 - \beta)(1 - 2\beta) \quad (7.194)$$

Înlocuind (7.193) și (7.194) în (7.190), rezultă

$$k^2 \beta(1 - \beta)(1 - 2\beta) - ck\beta(1 - \beta) + \beta^2(1 - \beta) = 0$$

de unde

$$k^2(1 - 2\beta) - ck + \beta = 0 \quad (7.195)$$

Constantele necunoscute c și k se aleg încât relația (7.195) să fie valabilă pentru orice valoare a lui β . Rezultă

$$\begin{cases} 1 - 2k^2 = 0 \\ k - c = 0 \end{cases} \Rightarrow k = c = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (7.196)$$

Unda se deplasează cu viteză constantă, egală cu

$$c = \frac{dx}{d\tau} = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (7.197)$$

În variabilele inițiale, viteza de propagare a undei este

$$\frac{dr}{dt} = \frac{1}{\sqrt{2}} (Dk_1 a_0^2)^{1/2} \quad (7.198)$$

Pentru condiții obișnuite, $k_1 = 2,5 \cdot 10^9 \text{ mol}^{-2} \text{ l}^6 \text{ s}^{-1}$, $D = 2 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, viteza va fi $c \approx 9,5 \text{ cm/min}$ [18]. Pentru a parcurge 1 cm, unda are nevoie de aproximativ 6 s. Considerăm difuzia lui B, în absența reacției. Timpul de difuzie este de ordinul r^2/D .

Pentru $r = 1 \text{ cm}$, $t_{\text{dif}} = 10^5 \text{ s}$. Unda de difuzie s-ar propaga de peste 10000 ori mai lent decât frontul de reacție. Viteza frontului crește, în conformitate cu (7.198), liniar cu concentrația inițială a reactantului și cu radicalul constantei de viteză k_1 și a coeficientului de difuzie D . O reacție rapidă și un coeficient de difuzie mare duc la creșterea vitezei undei.

Gradientul de concentrație la orice moment este dat de (7.193)

$$\frac{d\beta}{dz} = -k\beta(1-\beta)$$

unde $k = 1/\sqrt{2}$. Separând variabilele și integrând, rezultă

$$\beta(z) = \frac{\exp\left[-\frac{1}{\sqrt{2}}(z+z_0)\right]}{1 + \exp\left[-\frac{1}{\sqrt{2}}(z+z_0)\right]} \quad (7.199)$$

unde z_0 este o constantă de integrare. Luînd $z_0 = 0$, rezultă

$$\beta(z) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}z\right)}{1 + \exp\left(-\frac{1}{\sqrt{2}}z\right)} \quad (7.200)$$

Profilul de concentrație al frontului de reacție este reprezentat în fig. 7.25. Ca o măsură a lățimii frontului undei, pot fi alese două mărimi [18]:

a. amplitudinea gradientului negativ maxim, $-(db/dr)_{\max}$, care apare la $b = \frac{1}{2}a_0$.

b. Distanța Δr dintre punctele corespunzătoare unor conversii de 25% și 75%.

În unități adimensionale, acestea sînt

$$\begin{cases} -(d\beta/dz)_{\max} = 1/\sqrt{32} \\ \Delta z = \frac{1}{\sqrt{2}} \ln 9 \end{cases}$$

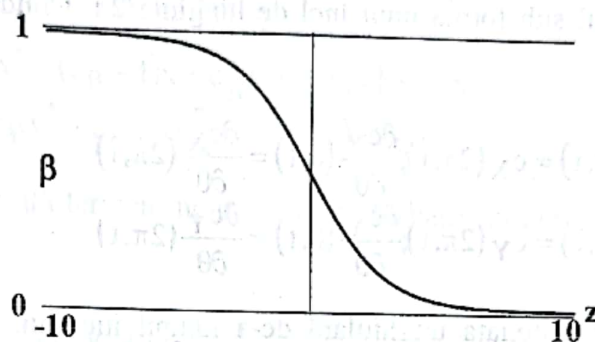


Fig. 7.25

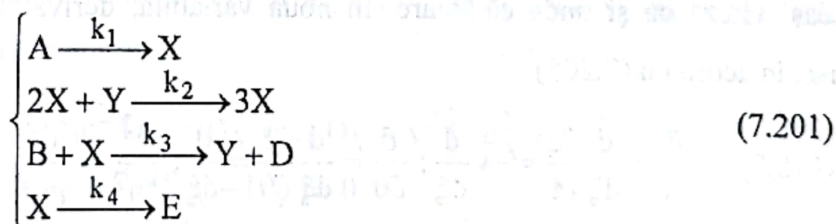
În unitățile inițiale

$$-\left(\frac{db}{dr}\right)_{\max} \sim \frac{1}{\Delta r} \sim \left(\frac{k_1 a_0^2}{D}\right)^{1/2}$$

Apariția unui front îngust este favorizată de o cinetică rapidă. O constantă de difuzie mare tinde să lățească frontul, dar duce la creșterea vitezei acestuia [18].

Unde călătoare în sisteme cu condiții periodice la frontieră

Considerăm un sistem în care au loc reacțiile [7]



Acestea alcătuiesc așa numitul model trimolecular, sau Brusselator [21]. Presupunem că transformările (7.201) au loc într-un sistem unidimensional, cu condiții periodice la frontieră. Pe lângă reacțiile chimice, în sistem are loc și procesul de difuzie. Concentrațiile speciilor A și B sînt presupuse constante, iar concentrația speciei B joacă rolul de parametru de control. X și Y reprezintă specii intermediare, iar

concentrațiile acestora, care sînt funcții de punct și de timp, reprezintă variabilele dinamice ale sistemului. Considerăm, pentru simplitate, constantele cinetice egale cu unitatea. Ecuațiile de evoluție au forma

$$\begin{cases} \frac{\partial c_X}{\partial t} = c_A - (c_B + 1)c_X + c_X^2 c_Y + D_X \nabla^2 c_X \\ \frac{\partial c_Y}{\partial t} = c_B c_X - c_X^2 c_Y + D_Y \nabla^2 c_Y \end{cases} \quad (7.202)$$

Considerăm reactorul sub forma unui inel de lungime 2π . Condițiile la frontieră sînt periodice

$$\begin{cases} c_X(0, t) = c_X(2\pi, t); \frac{\partial c_X}{\partial \theta}(0, t) = \frac{\partial c_X}{\partial \theta}(2\pi, t) \\ c_Y(0, t) = c_Y(2\pi, t); \frac{\partial c_Y}{\partial \theta}(0, t) = \frac{\partial c_Y}{\partial \theta}(2\pi, t) \end{cases} \quad (7.203)$$

unde θ reprezintă coordonata unghiulară de-a lungul inelului. Ecuațiile (7.202) cu condițiile la frontieră (7.203) admit starea staționară uniformă spațial

$$\begin{cases} c_{X0} = c_A \\ c_{Y0} = c_B / c_A \end{cases} \quad (7.204)$$

În această geometrie, sistemul (7.202) prezintă soluții de tipul undelor călătore: un puls de concentrație se deplasează, cu viteză constantă v , în jurul inelului. Introducem variabila

$$\xi = \theta - vt \quad (7.205)$$

Această coordonată corespunde unui sistem de referință mobil, care se deplasează cu aceeași viteză ca și unda călătore. În noua variabilă, derivatele din (7.202) pot fi scrise, în acord cu (7.205)

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{d}{d\xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} = -v \frac{d}{d\xi}; \quad \frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{d}{d\xi} \frac{\partial \xi}{\partial \theta} = \frac{d}{d\xi}; \quad \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} = \frac{d^2}{d\xi^2} \quad (7.206)$$

Cu (7.206), ecuațiile de evoluție (7.202) devin

$$\begin{cases} D_X c_X'' - (c_B + 1)c_X + c_X^2 c_Y + c_A = -vc_X' \\ D_Y c_Y'' + c_B c_X - c_X^2 c_Y = -vc_Y' \end{cases} \quad (7.207)$$

unde, cu ' și '' am notat derivatele de ordinul I, respectiv al II-lea, în raport cu ξ . Condițiile la frontieră sînt

$$\begin{cases} c_X(\xi) = c_X(2\pi + \xi) \\ c_Y(\xi) = c_Y(2\pi + \xi) \end{cases} \quad 0 \leq \xi \leq 2\pi$$

Considerăm mici perturbații în jurul stării staționare uniforme spațial (7.204)

$$\begin{cases} c_X = c_{X0} + x \\ c_Y = c_{Y0} + y \end{cases} \quad (7.208)$$

Înlocuind (7.208) în (7.207) și ținând cont de condiția de staționaritate, se obțin ecuațiile de evoluție pentru perturbații

$$\begin{cases} D_X x'' + (c_B - 1)x + c_A^2 y + h(x, y) = -vx' \\ D_Y y'' - c_B x - c_A^2 y - h(x, y) = -vy' \end{cases} \quad (7.209)$$

unde $h(x, y)$ reprezintă termeni neliniari în perturbații. În aproximația liniară, (7.209) devine

$$\begin{cases} D_X x'' + (c_B - 1)x + c_A^2 y = -vx' \\ D_Y y'' - c_B x - c_A^2 y = -vy' \end{cases} \quad (7.210)$$

Căutăm pentru sistemul (7.210) o soluție periodică, de forma

$$\begin{pmatrix} x(\xi) \\ y(\xi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} e^{im\xi} \quad (7.211)$$

Înlocuind (7.211) în (7.210), se obține ecuația caracteristică

$$\begin{vmatrix} c_B - 1 - D_X m^2 + imv & c_A^2 \\ -c_B & -c_A^2 - D_Y m^2 + imv \end{vmatrix} = 0 \quad (7.212)$$

Dezvoltăm determinantul din (7.212) și separăm partea reală și cea imaginară. Se obține astfel sistemul

$$\begin{cases} m^4 D_X D_Y + m^2 (c_A^2 D_X + D_Y - c_B D_Y - v^2) + c_A^2 = 0 \\ (c_B - 1 - c_A^2)mv - m^3 v(D_X + D_Y) = 0 \end{cases} \quad (7.213)$$

Din cea de-a doua ecuație (7.213), rezultă că

$$c_B = 1 + c_A^2 + m^2 (D_X + D_Y) \quad (7.214)$$

care reprezintă condiția de apariție a instabilității în sistem (condiția de apariție a unui puls de ordin m). Înlocuind (7.214) în prima ecuație (7.213), se obține viteza de propagare pentru pulsul de ordin m

$$v^2 = v_m^2 = \frac{c_A^2}{m^2} + c_A^2 (D_X - D_Y) - D_Y^2 m^2 \quad (7.215)$$

Viteza de propagare v_m este reală, în acord cu (7.215), dacă

$$D_Y^2 m^2 \leq \frac{A^2}{m^2} + A^2 (D_X - D_Y)$$

Expresia (7.215) pentru v_m este o funcție descrescătoare de m . Cele mai rapide moduri vor fi cele avînd lungimea de undă mare.

7.11 Rolul fluctuațiilor în evoluția sistemelor chimice și biochimice

În domeniul neliniar al termodinamicii proceselor ireversibile, unde constrîngerile sînt mari, fluctuațiile din interiorul unui sistem și perturbațiile ce acționează asupra acestuia se pot amplifica, obligînd sistemul să evolueze departe de starea de echilibru. În acest subcapitol, vom analiza succint rolul fluctuațiilor în evoluția sistemelor cu autoorganizare, de la cele mai simple la cele mai complexe. În acest scop, vom considera un sistem în care speciile chimice interne au proprietăți autocatalitice (de replicare), redată prin reacția

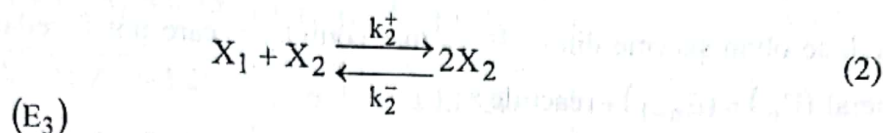


Se presupune că, într-un interval de timp dt extrem de mic, au loc erori în replicarea speciei X_{i+1} . Datorită acestor erori, în loc de reacția (7.216), se vor scrie următoarele două reacții ce se desfășoară numai în acest interval elementar de timp

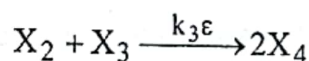
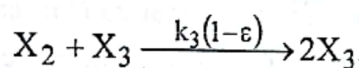


În (7.217) și (7.218), ε reprezintă un parametru care măsoară intensitatea erorii în replicare. Acest parametru este extrem de mic, de ordinul 10^{-10} . Prigogine [23] și Eigen [24] emit ipoteza că aceste erori în replicare pot fi considerate ca fluctuații. Luînd în considerație această ipoteză, noi am demonstrat că sistemele ce conțin specii cu proprietăți autocatalitice pot deveni din ce în ce mai complexe, prin apariția a noi specii, și acestea cu proprietăți autocatalitice [25].

Pentru început, vom lua următorul sistem cu autoorganizare, cu trei specii interne, propus de Hanusse [26]

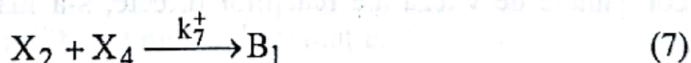
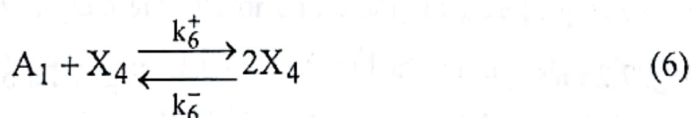
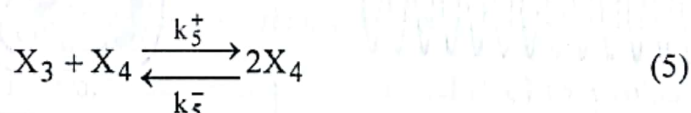


Presupunem că specia X_3 suferă o eroare de replicare. În acest caz, conform cu (7.217) și (7.218), avem



De îndată ce a apărut specia nouă X_4 , sistemul (E_3) face tranziția la un alt sistem, (E_4) , cu patru specii intermediare cu proprietăți autocatalitice, deci mai complex.

Acesta este sistemul (E_3) , la care se adaugă reacțiile

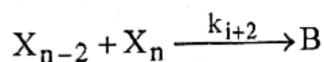
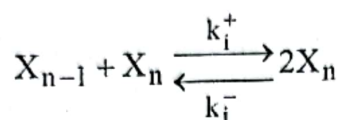


Prin același mecanism (eroare în replicarea speciei X_4), se obține specia X_5 , iar sistemul (E_4) face tranziția la sistemul (E_5) , cu cinci specii intermediare. Acesta este (E_4) , la care se adaugă





Procedînd astfel, se obţin sisteme din ce în ce mai complexe, care pot fi redacte prin algoritmul general $(E_n) = (E_{n-1}) + \text{reacțiile}$:



În aceste sisteme, A și A_1 joacă rolul de forțe termodinamice. Pe măsură ce sistemele cresc în complexitate, valorile pentru A și A_1 cresc.

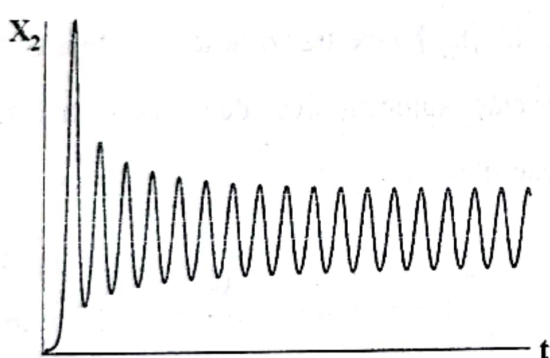


Fig. 7.26 a

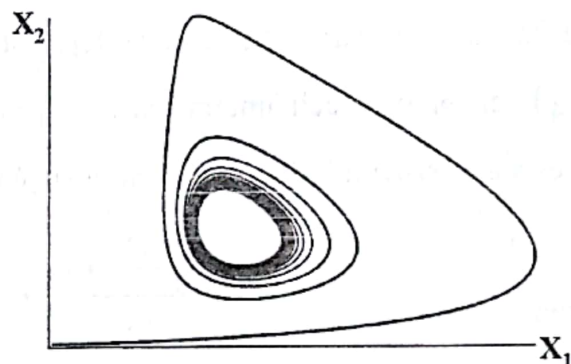


Fig. 7.26 b

Pentru constantele de viteză ale reacțiilor directe, s-a luat $k_p^+ = 1$, iar pentru cele inverse $k_p^- = 0,1$. Pentru cîteva sisteme (E_3 , E_4 , E_5 și E_6), s-au scris ecuațiile de evoluție de forma

$$\frac{dX_i}{dt} = F_i(\vec{X}, \lambda)$$

Studiul stabilității stărilor staționare s-a realizat prin determinarea valorilor proprii ale matricei Jacobiene (v. paragraful 6.1). Valorile parametrului de control și valorile proprii corespunzătoare sînt date în tabelul de mai jos.

E_n	Valorile constrîngerii λ	Valorile proprii
E_3	$A = 1,05$	$5,08 \cdot 10^{-3} \pm 1,258i$
E_4	$A = 1; A_1 = 0,75$	$1,81 \cdot 10^{-3} \pm 1,192i$
E_5	$A = 1; A_1 = 1,25$	$1,36 \cdot 10^{-1} \pm 1,155i$
E_6	$A = 1; A_1 = 2$	$1,022 \cdot 10^{-2} \pm 1,178i$

Toate aceste sisteme, și altele obținute din (4), au $\omega_r > 0$ și $\omega_i \neq 0$, deci prezintă oscilații periodice de tip ciclu limită. Într-adevăr, evoluția temporală și portretul fazelor date în fig. 7.26 confirmă acest comportament.

Din analiza datelor prezentate în tabelul de mai sus, rezultă o concluzie extrem de importantă, compatibilă cu teoria generală a lui Prigogine. Cu cât sistemul crește în complexitate, mărimea constrîngerilor (forțelor termodinamice) trebuie să crească, pentru ca noul sistem să evolueze către o structură cu autoorganizare. Într-adevăr, pentru ca noua specie, X_{i+1} , care apare ca o fluctuație, avînd la început o concentrație de ordinul 10^{-9} , să se amplifice, trebuie ca valorile forțelor termodinamice să se afle la dreapta bifurcației Hopf. De exemplu, dacă în sistemul (E_5) se ia $A_1 = 0,75$ în loc de $A_1 = 1,25$, concentrația speciei X_5 nu crește, pentru a obliga sistemul să evolueze departe de starea staționară. În aceste condiții, sistemul (E_5) va involua către (E_4).

Modelul de evoluție a sistemelor cu autoorganizare propus de noi este în acord total cu teoria lui Prigogine și Eigen, privind evoluția sistemelor prin intermediul fluctuațiilor. De altfel, Shirane [27] citează acest model, alături de modelele propuse de Prigogine și Haken [28], ca model de evoluție.

8. Dinamică neliniară în sisteme electrochimice

Principalele rezultate obținute în acest domeniu sînt prezentate în articolele de sinteză elaborate recent de Krischer. Din acest motiv, vom urma, pe scurt, liniile principale ale prezentării generale din aceste lucrări [29,30].

Pentru ca un sistem să prezinte o dinamică tipic neliniară, trebuie satisfăcute următoarele condiții [7]:

- sistemul trebuie menținut suficient de departe de echilibru;
- ecuațiile de evoluție trebuie să fie neliniare.

În majoritatea sistemelor electrochimice, apariția instabilităților dinamice este efectul combinat al cineticii de electrod, proceselor de transport ce au loc în electrolit și circuitului electric exterior celulei electrochimice. Numai cinetica de electrod depinde de pașii elementari de reacție ce au loc la interfață. Ultimele două elemente sînt determinate de tipul de control (potențiostatic sau galvanostatic) și de geometria celulei electrochimice [29]. În practica de laborator, se lucrează, în general, cu celule electrochimice cu trei electrozi [31]:

- electrodul de lucru. Acesta este electrodul pe care se desfășoară procesul electrochimic studiat.
- electrodul de referință. Acesta poate fi, de exemplu, un electrod standard de calomel; curentul prin acest electrod este zero, deci electrodul poate fi considerat la echilibru în electrolit; rolul electrodului de referință este să măsoare potențialul local în electrolit.
- contraelectrodul servește la închiderea circuitului în celula electrochimică.

Acest sistem de trei electrozi permite diverse moduri de operare, între care cel mai des utilizate sînt:

- a) Controlul potențiostatic. Căderea de potențial între electrodul de referință și electrodul de lucru este constantă, egală cu tensiunea aplicată de potențiostat, U . Contraelectrodul furnizează suficient curent electrodului de lucru, pentru a menține această diferență de potențial constantă.
- b) Controlul galvanostatic. În acest caz, diferența de potențial între electrodul de lucru și electrodul de referință este modificată astfel încît curentul total prin electrodul de lucru să fie constant.

În cele ce urmează, vom prezenta numai anumite elemente fundamentale legate de

sistemele controlate potențiostatic.

8.1. Circuitul echivalent al celulei electrochimice. Bistabilitate.

Acest circuit este prezentat în fig. 8.1 [29]. Capacitatea și impedanța plasate în paralel modelează stratul dublu electric din fața electrodului de lucru (interfața electrod/electrolit), iar rezistența ohmică plasată în serie cuprinde rezistența electrolitului între electrodul de lucru și cel de referință și rezistența ohmică ce poate exista în circuitul extern.

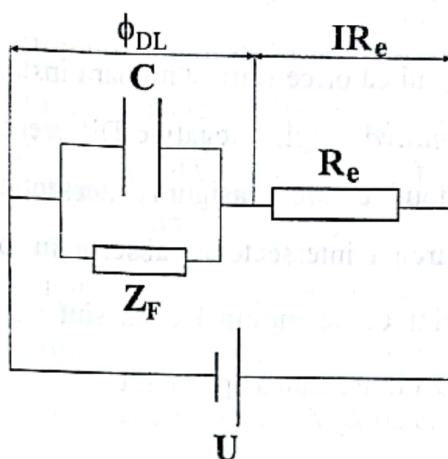


Fig. 8.1

Ecuția de bilanț a curentului pentru circuitul echivalent este [29]

$$I = I_{\text{reac}} + I_{\text{cap}} \quad (8.1)$$

Curentul total la electrodul de lucru este suma dintre curentul de reacție la electrod și curentul capacitiv, corespunzător încărcării stratului dublu electric din fața electrodului de lucru. Această ecuație se poate scrie

$$CA \frac{d\phi_{\text{DL}}}{dt} + I_{\text{reac}}(\phi_{\text{DL}}) = \frac{U - \phi_{\text{DL}}}{R_e} \quad (8.2)$$

unde C este capacitatea stratului dublu pe unitate de arie, A este aria electrodului de lucru, R_e este suma rezistențelor Ohmice aflate în serie cu electrodul de lucru, ϕ_{DL} este căderea de potențial pe stratul dublu, iar U este tensiunea externă aplicată. Reprezentînd grafic caracteristica curent-tensiune a interfeței electrod/electrolit și dreapta de sarcină, intersecția acestora va da, conform ecuației (8.2), stările staționare ale sistemului. Cînd caracteristica curent-tensiune este în formă de N , ecuația (8.2)

posedă, într-un anumit domeniu al parametrilor (U, R_e) , trei stări staționare. Ca urmare, sistemul va prezenta multistabilitate. Impedanța faradaică evaluată la starea staționară este

$$Z_F = \left. \frac{d\phi_{DL}}{dI_{\text{reac}}} \right|_{\phi = \phi_{DL}^0} \quad (8.3)$$

O stare staționară este instabilă dacă [29]

$$\begin{cases} Z_F < 0 \\ R_e > |Z_F| \end{cases} \quad (8.4)$$

Prima inegalitate exprimă faptul că orice stare staționară instabilă se află pe o porțiune cu rezistență diferențială negativă (engl. 'Negative Differential Resistance', NDR) a curbei curent-tensiune. A doua condiție asigură intersecția dreptei de sarcină cu caracteristica. Dreapta de sarcină intersectează abscisa în $\phi_{DL} = U$ și ordonata în $I = U/R_e$ (fig. 8.2). Urmărim ce se întâmplă dacă sînt satisfăcute condițiile (8.4), menținînd constant R_e și scăzînd tensiunea aplicată, U .

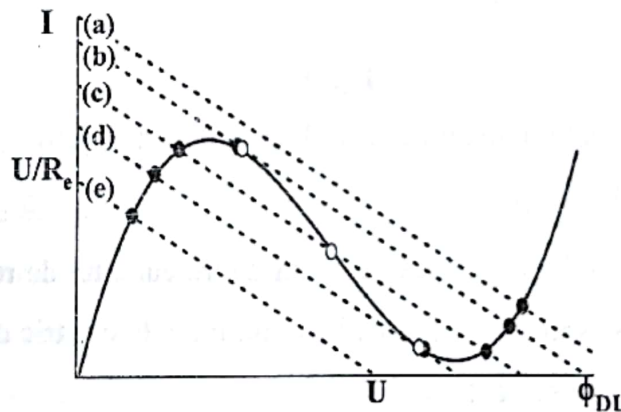


Fig. 8.2

Dacă U este suficient de mare, există un singur punct de intersecție a dreptei de sarcină cu caracteristica curent-tensiune, la valori mari ale lui ϕ_{DL} (dreapta (a) în fig. 8.2). Curentul de reacție fiind mic, sistemul se află într-o stare staționară pasivă, iar aceasta este stabilă. Scăzînd U , apare o situație în care dreapta de sarcină este tangentă la caracteristică. Aceasta corespunde unei bifurcații nod-șea, în care sînt generate două noi stări staționare, una instabilă și una stabilă (dreapta (b) în fig. 8.2). La valori mai mici ale lui U , apare situația clasică a bistabilității (c în fig. 8.2): există trei stări staționare, cele două exterioare fiind stabile. O mică perturbație a stării intermediare va

conduce sistemul, în funcție de semn, pe una din stările stabile. Dintre stările staționare stabile, una este pasivă iar cealaltă este activă (corespunde unei valori mari a curentului de reacție). Scăzând în continuare U , apare a doua bifurcație nod-șea (situația (d) în fig. 8.2), apoi sistemul prezintă monostabilitate și este în stare activă (situația e).

Interesează cauzele care pot conduce la existența unei caracteristici în formă de N. În general, curentul de reacție are forma [29]

$$I_{\text{reac}}(\phi_{\text{DL}}) = nFAk(\phi_{\text{DL}})c \quad (8.5)$$

unde n este numărul electronilor implicați în procesul de la electrod, F constanta lui Faraday, k constanta de viteză și c concentrația speciilor electroactive. Rezultă că

$$Z_F^{-1} = \frac{dI_{\text{reac}}(\phi_{\text{DL}})}{d\phi_{\text{DL}}} = nF \left(ck(\phi_{\text{DL}}) \frac{dA}{d\phi_{\text{DL}}} + Ac \frac{dk(\phi_{\text{DL}})}{d\phi_{\text{DL}}} + Ak(\phi_{\text{DL}}) \frac{dc}{d\phi_{\text{DL}}} \right) \quad (8.6)$$

În consecință, există trei origini ale unei impedanțe diferențiale negative [29]:

1. aria disponibilă a electrodului scade cu creșterea polarizării, $dA/d\phi_{\text{DL}} < 0$. Este cazul în care apare absorbția unei specii ce inhibă reacția. Gradul de absorbție crește cu ϕ_{DL} . Această situație se întâlnește în formarea stratului de oxid, în cazul multor reacții de electrodisolvare a unor metale;
2. descreșterea vitezei de transfer a electronilor cu creșterea polarizării, $dk(\phi_{\text{DL}})/d\phi_{\text{DL}} < 0$;
3. descreșterea concentrației speciilor electroactive cu creșterea potențialului, datorită unor efecte de strat dublu, $dc/d\phi_{\text{DL}} < 0$.

În cazul sistemelor controlate potențiostatic, U este fixat, dar ϕ_{DL} , ca și curentul, este variabil. Sistemele în care rezistența externă poate fi neglijată și deci $U = \phi_{\text{DL}}$, se numesc strict potențiostatice și nu pot prezenta instabilități dinamice. Sistemul este galvanostatic dacă $R_e \rightarrow \infty$ și $U \rightarrow \infty$ (curentul total este menținut constant).

8.2. Oscilații periodice în sisteme controlate potențiostatic

Comportarea oscilantă necesită, în sisteme autonome, existența a cel puțin două variabile dinamice. Considerăm cazul unei reacții electrocatalitice. A doua variabilă este concentrația speciei electroactive, c . La electrod, c satisface legea I a lui Fick. La o distanță oarecare de electrod, concentrația are o valoare constantă, c^b . Se presupune că în stratul de difuzie concentrația variază liniar, de la valoarea din fața electrodului de lucru, notată cu c , la c^b . Ecuatiile de evoluție au forma [29]

$$\begin{cases} C \frac{d\phi_{DL}}{dt} = -nFck(\phi_{DL}) + \frac{U - \phi_{DL}}{R_e A} \\ \frac{dc}{dt} = -\frac{2}{\delta} ck(\phi_{DL}) + \frac{2D}{\delta^2} (c^b - c) \end{cases} \quad (8.7)$$

unde D este coeficientul de difuzie al speciei electroactive iar δ este grosimea stratului de difuzie. În ecuația de evoluție pentru concentrație, primul termen din membrul drept descrie scăderea concentrației datorită reacției chimice, iar al doilea creșterea datorată difuziei din masa de soluție. Pentru straturi subțiri de difuzie (ce pot fi obținute, de exemplu, la viteze mari de rotație, în cazul electrozilor disc rotitori), termenul de difuzie devine mult mai mare decât cel de reacție. Concentrația în fața electrodului ia valoarea c^b , iar sistemul poate prezenta doar bistabilitate (doar ϕ_{DL} este variabilă).

Adimensionalizăm ecuațiile de evoluție (8.7), cu ajutorul schimbării de variabile [29]

$$c' = \frac{c}{c^b}; \phi'_{DL} = \frac{nF}{RT} \phi_{DL}; t' = \frac{2D}{\delta^2} t; U' = \frac{nF}{RT} U; k'(\phi_{DL}) = \frac{\delta}{D} k(\phi_{DL}) \quad (8.8)$$

Înlocuind (8.8) în ecuațiile de evoluție (8.7) și renunțând la indicele prim, se obțin ecuațiile de evoluție adimensionale

$$\begin{cases} \varepsilon \frac{d\phi_{DL}}{dt} = -ck(\phi_{DL}) + \frac{U - \phi_{DL}}{\rho} \\ \frac{dc}{dt} = -ck(\phi_{DL}) + 1 - c \end{cases} \quad (8.9)$$

unde $\varepsilon = \frac{2CRT}{c^b n^2 F^2 \delta}$ și $\rho = \frac{c^b D n^2 F^2 R_e A}{\delta RT}$. Pentru $k(\phi_{DL})$ dat, deci pentru o caracteristică curent-tensiune fixată, există trei parametri care determină

comportamentul dinamic:

- ε , care descrie raportul scalelor de timp ale variației ϕ_{DL} și c ;
- tensiunea aplicată adimensională U ;
- rezistența externă adimensională ρ .

Stabilitatea stărilor staționare poate fi studiată prin metoda modurilor normale. Ecuațiile de evoluție pentru perturbațiile $\delta\phi_{DL}$ și δc au forma [29]

$$\begin{pmatrix} \frac{d\delta\phi_{DL}}{dt} \\ \frac{d\delta c}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon^{-1} \left[-c \frac{dk(\phi_{DL})}{d\phi_{DL}} - \frac{1}{\rho} \right] & -\varepsilon^{-1} k(\phi_{DL}) \\ -c \frac{dk(\phi_{DL})}{d\phi_{DL}} & -k(\phi_{DL}) - 1 \end{pmatrix}_{SS} \begin{pmatrix} \delta\phi_{DL} \\ \delta c \end{pmatrix} = J \begin{pmatrix} \delta\phi_{DL} \\ \delta c \end{pmatrix} \quad (8.10)$$

unde J este matricea Jacobiană asociată sistemului (8.9), evaluată la starea staționară.

În cazul unei bifurcații nod-șea, o valoare proprie reală devine zero, deci $\det(J)$ se anulează. Pentru o bifurcație Hopf, partea reală a două valori proprii complex conjugate se anulează. O stare staționară este stabilă dacă $\text{Tr}(J) < 0$ și $\text{Det}(J) > 0$.

Condițiile de stabilitate devin, în acord cu (8.9) [29]

$$\begin{cases} \text{Tr}(J) < 0 \Leftrightarrow -\frac{dk(\phi_{DL})}{d\phi_{DL}} \Big|_{SS} < \frac{1}{c_{SS}\rho} + \frac{\varepsilon}{c_{SS}} \left[1 + k(\phi_{DL}^{SS}) \right] \\ \text{Det}(J) > 0 \Leftrightarrow -\frac{dk(\phi_{DL})}{d\phi_{DL}} \Big|_{SS} < \frac{\left[1 + k(\phi_{DL}^{SS}) \right]}{\rho} \frac{1}{c^{SS}} \end{cases} \quad (8.11)$$

Termenii din membrul drept sînt pozitivi pentru ambele inegalități. O stare staționară aflată pe o ramură cu pantă pozitivă a caracteristicii

$$\frac{dk(\phi_{DL})}{d\phi_{DL}} \Big|_{SS} > 0 \quad (8.12)$$

este stabilă, pentru orice valori ale parametrilor. Dacă $\text{Det}(J) < 0$, starea staționară este un punct șea. Dacă $dk(\phi_{DL})/d\phi_{DL}|_{SS} < 0$, conform (8.11) determinantul este negativ dacă $\rho > \rho_{\text{critic}}$. La valoarea critică, $\det(J) = 0$, care este condiția de bifurcație nod-șea. Comportarea bistabilă apare pentru o valoare suficient de mare a rezistenței în serie. O stare staționară a oscilatorului NDR suferă o bifurcație Hopf dacă $\text{Tr}(J) = 0$ și $\det(J) > 0$. Condițiile sînt satisfăcute dacă ρ nu este prea mare, iar ε este suficient de mic (la perturbarea stării staționare, potențialul reacționează mai rapid decât

concentrația). În termeni de sisteme activator-inhibitor, în acest sistem, căderea de potențial pe stratul dublu electric joacă rolul de activator (elementul J_{11} din matricea Jacobiană este pozitiv în cazul instabilității stării staționare) iar concentrația joacă rolul de inhibitor (elementul J_{22} din matricea Jacobiană este negativ).

8.3. Condițiile formării structurilor spațiotemporale

În cazul sistemelor omogene spațial, diferite puncte de pe electrodul de lucru evoluează sincron. În sistemele extinse spațial, dinamica este guvernată de [29]:

- termenul de reacție (termen local);
- termenul de cuplaj spațial, ce provine din procesele de transport paralel cu electrodul.

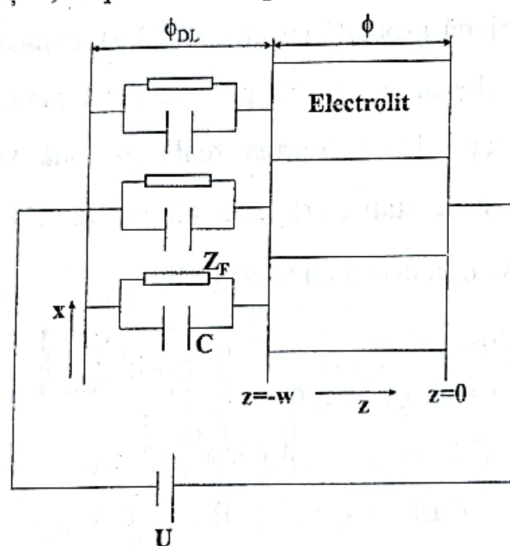


Fig. 8.3

În modelul cu o variabilă prezentat anterior, potențialul ϕ_{DL} este variabila autocatalitică. Orice structură spațială în acest sistem este asociată cu o distribuție neuniformă spațială a lui ϕ_{DL} , și deci cu un câmp electric paralel cu electrodul. Diferite puncte de pe electrod sînt cuplate prin intermediul curenților de migrație, paraleli cu electrodul. Dacă potențialul ϕ_{DL} se schimbă într-un punct, curenții de migrație fac schimbarea perceptibilă în celelalte puncte de pe electrod. Circuitul echivalent sistemului extins spațial este prezentat în fig. 8.3 [29].

Celula electrochimică este aproximată cu un sistem unidimensional, cu condiții periodice la frontieră. Această aproximație corespunde unui electrod inel, cu circumferința mult mai mare decît lățimea. Electrolitul este bidimensional, satisface

condiția de electroneutralitate și are conductivitatea σ . Un segment infinitesimal al interfeței este descris de un condensator C în paralel cu impedanța Faradaică Z_F .

Ecuatiile de evoluție pentru sistemul distribuit spațial au forma [29]

$$\begin{cases} C \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_{z=-w} = i_{\text{reac}}(\phi_{DL}, c) + \sigma \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_{z=-w} \\ \frac{\partial c}{\partial t} \Big|_{z=-w} = \frac{2}{nF\delta} i_{\text{reac}}(\phi_{DL}, c) + \frac{2D}{\delta^2} (c^b - c) \Big|_{z=-w} \end{cases} \quad (8.13)$$

unde i_{reac} este densitatea curentului de reacție la electrodul de lucru, iar σ este conductivitatea electrolitului. Trecem la variabile adimensionale, utilizând transformările (8.8). În plus, pentru coordonatele spațiale

$$x' = \frac{2\pi x}{L}; \quad z' = \frac{z}{w} \quad (8.14)$$

unde, cu x am notat coordonata de-a lungul electrodului de lucru, z este coordonata perpendiculară pe electrodul de lucru, L este lungimea electrodului de lucru și w distanța dintre electrodul de lucru și un plan echipotențial. Această aproximație, a planului echipotențial, reflectă una dintre situațiile [29]:

- distanța dintre electrodul de lucru și cel de referință este atât de mare încât toate neomogenitățile spațiale se atenuează pînă în acel punct (unde este situat electrodul de referință);
- în cazul distanțelor mai mici, planul echipotențial este la capătul stratului dublu al contraelectrodului. Diferența de potențial între electrodul de lucru și planul echipotențial este menținută constantă și egală cu tensiunea aplicată.

Sistem cu o variabilă

Din condiția de electroneutralitate și uniformitatea concentrației în masa de soluție, rezultă că potențialul în electrolit satisface ecuația Laplace. În variabile adimensionale, aceasta are forma [29]

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z'^2} = -\beta^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} \quad x \in [0, 2\pi), z \in [-1, 0] \quad (8.15)$$

unde $\beta = \frac{2\pi w}{L}$. Condițiile la frontieră sînt de forma

$$\begin{cases} \phi(x, z, t) = \phi(x + 2\pi, z, t) \\ \phi(x, z = 0, t) = 0 \\ \phi(x, z = -1, t = 0) = \phi^0 \end{cases} \quad (8.16)$$

Acestea corespund condițiilor periodice la frontieră în raport cu x , existenței unui plan echipotențial în $z = 0$ și unei distribuții oarecare de potențial la electrodul de lucru. În variabile adimensionale, ecuația de evoluție a potențialului în fața electrodului de lucru are forma [29]

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_{z=-1} = -i_{\text{reac}}(\phi_{\text{DL}}) - \frac{\sigma}{\beta} \left. \frac{\partial \phi}{\partial z} \right|_{z=-1} \quad (8.17)$$

Căderea de potențial pe stratul dublu și potențialul în electrolit, în fața electrodului de lucru, $\phi(x, z = -1)$ sînt legate prin

$$U = \phi_{\text{DL}}(x) + \phi(x)|_{z=-1} \quad (8.18)$$

Sistemul este descris de ecuația eliptică (8.15), cu condițiile la frontieră (8.16) și (8.17), din care a doua este variabilă în timp. Acest sistem poate fi redus la unul de ecuații diferențiale ordinare, utilizînd o metodă spectrală [29]. Potențialul se dezvoltă după relația

$$\phi(x, z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \{A_n(t) \cos(nx) + B_n(t) \sin(nx)\} \sinh(n\beta z) + A_0(t, z) \quad (8.19)$$

Orice distribuție neuniformă de potențial la electrod este atenuată în electrolit. Atenuarea este mai rapidă pentru lungimi de undă mici. Al doilea termen din membrul drept al ecuației (8.17) conține două contribuții:

- curentul care trece prin electrolit pentru o distribuție omogenă de potențial, cînd potențialul este funcție liniară de coordonata perpendiculară pe electrodul de lucru, z

$$\frac{\sigma}{\beta} (U - \phi_{\text{DL}}) = \frac{\sigma}{\beta} \phi|_{z=-1} \quad (8.20)$$

- contribuția curenților paraleli cu electrodul, ce dau cuplajul spațial. Ecuația (8.17) poate fi rescrisă [30]

$$\frac{\partial \phi_{\text{DL}}}{\partial t} = -i_{\text{reac}}(\phi_{\text{DL}}) - \frac{\sigma}{\beta} \phi|_{z=-1} + \frac{\sigma}{\beta} \left(\phi|_{z=-1} - \left. \frac{\partial \phi}{\partial z} \right|_{z=-1} \right) = g(\phi_{\text{DL}}) + \frac{\sigma}{\beta} \left(\phi|_{z=-1} - \left. \frac{\partial \phi}{\partial z} \right|_{z=-1} \right)$$

Al doilea termen din membrul drept al acestei ecuații descrie cuplajul spațial. Atributele cuplajului sînt raza de acțiune și intensitatea:

- raza de acțiune a cuplajului este o măsură a distanței caracteristice pe care o modificare a stării unei poziții particulare influențează instantaneu pozițiile vecine;
- intensitatea cuplajului este raportul timpilor caracteristici ai dinamicii locale și cuplajului spațial. În sistemele electrochimice, raza de acțiune a cuplajului este determinată de parametrul geometric β , în timp ce conductivitatea specifică σ determină intensitatea cuplajului. Dacă $\beta > 1$, cuplajul este cu rază lungă de acțiune, sau nelocal. Prin aceasta diferă de cuplajul difuziv, care este dominant în cazul sistemelor cu reacție-difuzie. Cuplajul difuziv este local (cu rază scurtă de acțiune). O trăsătură particulară sistemelor electrochimice este că parametrul β , deci și raza de acțiune a cuplajului, pot fi modificate experimental. De asemenea, cuplajul poate fi:
 - pozitiv: o valoare mai pozitivă a potențialului într-un anumit loc de pe electrod face ca și celelalte zone de pe electrod să devină mai pozitive;
 - negativ: dacă potențialul într-o anumită regiune a electrodului de lucru devine mai pozitiv, atunci, ca urmare a acestui lucru, în celelalte zone a electrodului va fi mai negativ [29].

Înlocuind dezvoltarea (8.19) în (8.17) și ținând cont de (8.18), se obțin ecuațiile de evoluție corespunzătoare diferitelor moduri

$$\begin{cases} \frac{da_0}{dt} = -f_0(a_i, b_i) - \frac{\sigma}{\beta} a_0 \\ \frac{da_n}{dt} = -f_n(a_i, b_i) - \sigma n \coth(n\beta) a_n \end{cases} \quad (8.21)$$

unde $f_i(a_i, b_i)$ sînt componentele Fourier ale densității curentului de reacție i_{reac} . Sistemul (8.21) este trunchiat la un ordin suficient de mare pentru a asigura o descriere spațială suficient de precisă a proceselor ce au loc la electrodul de lucru. Ca o consecință a cuplajului cu rază lungă de acțiune, fronturile ce apar în sistemul bistabil sînt accelerate, spre deosebire de sistemele cu reacție-difuzie, în care cuplajul difuziv este local și deplasarea fronturilor se face cu viteză constantă.

Sistem cu două variabile

Ca și în cazul oscilatorului punctiform, concentrația variază liniar în fața electrodului de lucru, în stratul de difuzie, pînă la valoarea constantă din masa de soluție. Rezultă

$$c = \begin{cases} c|_{z=-1} + (1 - c|_{z=-1})(z+1)\frac{w}{\delta} & -1 \leq z \leq -1 + \frac{\delta}{w} \\ 1, & -1 + \frac{\delta}{w} \leq z \leq 0 \end{cases} \quad (8.22)$$

Concentrația se schimbă în fața electrodului de lucru ca urmare a reacției și a difuziei ce are loc perpendicular pe electrod. În variabile adimensionale, ecuația de evoluție pentru concentrație din sistemul (8.13) se scrie

$$\left. \frac{\partial c}{\partial t} \right|_{z=-1} = -|i_{\text{reac}}(\phi_{\text{DL}}, c)| + 1 - c|_{z=-1} \quad (8.23)$$

În sistem pot să apară, în anumite condiții, instabilități spațiale: oscilația periodică omogenă spațial devine instabilă, cu apariția structurilor spațiotemporale.

8.4 Modelarea structurilor spațiotemporale în cazul electrodisoluției anodice a metalelor

În [32,33] este prezentat un model al structurilor ordonate ce apar în cazul electrodisoluției anodice a metalelor. Vom prezenta pe scurt acest model, împreună cu câteva exemple de structuri spațiotemporale tipic neliniare pe care le poate prezice.

Distribuția potențialului în electrolit este puternic influențată de toți electrozii (de lucru, de referință și contraelectrod). În model, este luat explicit în considerare un electrod punctiform, situat între electrodul de lucru și contraelectrod. Geometria celulei electrochimice este prezentată în fig. 8.4. Înălțimea celulei electrochimice (distanța dintre electrodul de lucru și contraelectrod) este h . Lățimea celulei, care este egală cu lungimea electrodului de lucru, este notată L .

$z = h$  Contraelectrod (CE)

• Electrod de referință (RE)

z

$z = 0$  Electrod de lucru (WE)

$x = 0$ $\longrightarrow$ x

$x = L$

Fig. 8.4

Presupunem că în soluția de electrolit dintre electrodul de lucru și contraelectrod este satisfăcută ecuația Laplace

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (8.24)$$

unde ϕ reprezintă potențialul în electrolit. Electrocul de lucru este inelar, de lungime L . Contraelectrocul este de asemenea un inel, iar electrocul de referință este punctiform, situat între electrocul de lucru și contraelectrocul. Condițiile la frontieră sînt periodice

$$\phi|_{x=0} = \phi|_{x=L} \quad (8.25)$$

La contraelectrocul, cinetica este presupusă liniară iar curentul capacitiv este neglijat

$$-\sigma \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_{z=h} = k(\phi_{z=h} - \phi_{\text{Metal}}) \quad (8.26)$$

unde k este o constantă de viteză, iar cu ϕ_{Metal} am notat potențialul metalului contraelectrocului. Potențialul electrocului de referință este menținut constant (sistemul este controlat potențiostatic)

$$\phi(x_{\text{RE}}, z_{\text{RE}}) = U \quad (8.27)$$

unde U este tensiunea totală aplicată între electrocul de referință și cel de lucru. Potențialul metalului electrocului de lucru este considerat zero.

Ecuția de evoluție pentru potențialul în fața electrocului de lucru este de forma primei ecuații din (8.13), unde curentul de reacție este funcție de potențialul electric și concentrația protonilor în fața electrocului de lucru

$$\sigma \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_{z=0} = -i_{\text{cap}} - i_{\text{reac}} = C \frac{\partial \phi}{\partial t} \Big|_{z=0} - \frac{A}{e^{-\alpha(\phi + V_f(H_{\text{WE}}^+))} + 1} \quad (8.28)$$

unde V_f este potențialul tranziției activ-pasiv (potențialul Flade), iar H_{WE}^+ este concentrația protonilor la suprafața electrocului de lucru, A este o constantă ce desemnează curentul de reacție maxim, iar α este o constantă mult mai mare decît unu.

Dependența curentului de reacție de ϕ_{DL} este dată de funcția treaptă Heaviside netezită, propusă de Wang et al. [34]. Modelul Franck-FitzHugh [35] ia în considerare dependența de pH a potențialului Flade ca feedback necesar sistemului pentru a oscila: metalul electrocului de lucru se dizolvă. Ca urmare, protonii migrează, îndepărtîndu-se de electrocul de lucru. Potențialul Flade se deplasează spre valori mai catodice și apare procesul de formare a stratului pasiv. Datorită pasivării, curentul scade. Protonii

difuzează înapoi din masa de soluție spre electrodul de lucru și potențialul Flade se deplasează spre valori mai anodice. Metalul redevine activ. Funcția treaptă Heaviside netezită este o modalitate simplă de a modela rezistența diferențială negativă (NDR) a caracteristicii curent-tensiune. Fig. 8.5 prezintă curentul de reacție ca funcție de căderea de potențial pe stratul dublu, pentru valori ale parametrilor folosite în simulări.

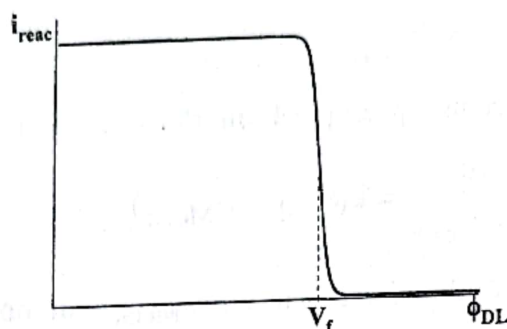


Fig. 8.5

Potențialul metalului electrodului de lucru este luat ca referință, în absența rezistenței externe. Căderea de potențial pe stratul dublu este

$$\phi_{DL} = \phi_{Metal} - \phi|_{z=0} = IR_{ext} - \phi|_{z=0} \quad (8.29)$$

unde R_{ext} este rezistența externă, iar I este curentul total. Dacă se ia în considerație o singură variabilă, ϕ_{DL} , concentrația protonilor este presupusă constantă, iar potențialul Flade este fixat. În sistemul cu două variabile, V_f este funcție de concentrația protonilor [32]

$$V_f = F_1 + F_2 \log(H_{WE}^+) \quad (8.30)$$

unde F_1 și F_2 sînt constante. Concentrația protonilor în fața electrodului de lucru este modificată datorită proceselor de migrație și difuzie [32,36]

$$\frac{\partial [H_{WE}^+]}{\partial t} = \frac{2D([H_{bulk}^+] - [H_{WE}^+])}{\delta^2} + \frac{2\mu[H_{WE}^+]}{\delta} \frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_{z=0} \quad (8.31)$$

unde D este coeficientul de difuzie al protonilor în soluție, $[H_{bulk}^+]$ este concentrația protonilor în masa soluției, μ este coeficientul de migrație a protonilor în soluție, iar δ este grosimea stratului de difuzie. Contribuția datorată reacției la electrod a fost neglijată. Migrația protonilor dinspre electrodul de lucru spre masa de soluție se datorează câmpului electric. Prin urmare, termenul de migrație va include concentrația

protonilor la electrodul de lucru.

Bistabilitate

Fig. 8.6 prezintă mecanismul apariției bistabilității în acest sistem. Curba reprezentată cu linie-punct este caracteristica $i_{\text{reac}}(\phi_{\text{DL}})$.

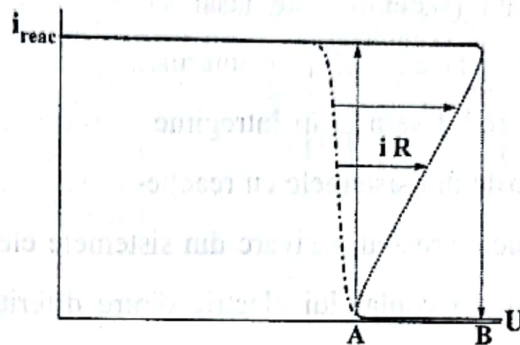


Fig. 8.6

Pentru a reprezenta curentul de reacție funcție de tensiunea aplicată în sistemul controlat potențiosstatic, U , trebuie luată în considerare corecția Ohmică, adică căderea Ohmică de potențial în electrolit. Ca urmare, caracteristica se deplasează, în acest caz, spre valori mai mari ale tensiunii, cu un termen egal cu corecția Ohmică. Caracteristica $i_{\text{reac}}(U)$ astfel obținută este reprezentată cu linie punctată în fig. 8.6. Se observă că, pentru o tensiune aplicată cuprinsă între A și B , sistemul prezintă bistabilitate. Variind tensiunea aplicată, apare un comportament histeretic.

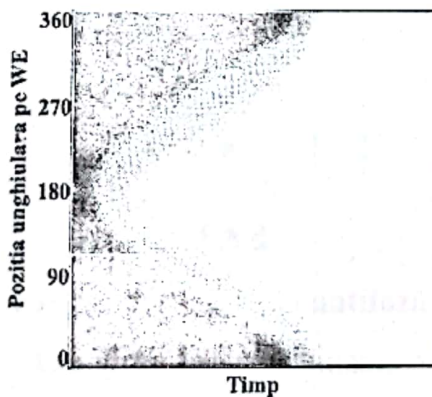


Fig. 8.7 a

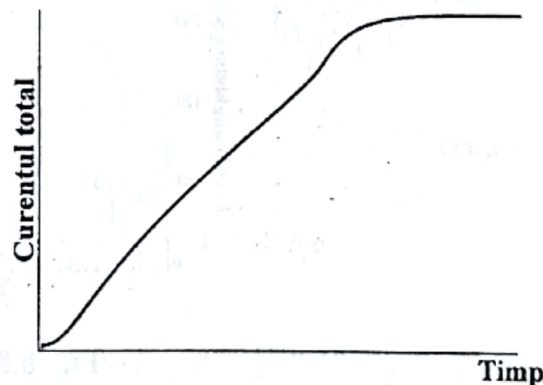


Fig. 8.7 b

Fig. 8.7 prezintă dinamica bistabilă în sistemul descris mai sus. În fig. 8.7 a este reprezentat potențialul în fața electrodului de lucru, ca funcție de timp (în abscisă) și coordonata angulară de-a lungul electrodului de lucru (în ordonată). Reprezentarea a fost făcută utilizând tonuri de gri; negru corespunde unei valori mai negative a potențialului, deci unei stări locale pasive a electrodului, iar alb corespunde unei valori

mai pozitive a potențialului, deci unei stări locale active a electrodului. Inițial, electrodul se află în starea pasivă, care este stabilă. În jurul poziției unghiulare de 180° , pe electrod este aplicată local o perturbație: valoarea locală a potențialului este fixată, pentru un timp scurt, mai pozitivă decât restul electrodului, după care perturbația este suprimată (sistemul este lăsat să evolueze liber). Zona activă se răspândește rapid pe întreg electrodul, prin intermediul unor fronturi de activare clar delimitate. În final, electrodul se află în întregime în starea activă, care este stabilă. Spre deosebire de fronturile din sistemele cu reacție-difuzie, care se propagă cu viteză constantă, fronturile de activare sau pasivare din sistemele electrochimice se propagă în general accelerat, datorită cuplajului electric dintre diferite zone de pe electrod, cuplaj care este nelocal [29]. În fig. 8.7 b este reprezentat curentul total corespunzător evoluției din fig. 8.7 a. Parametrii utilizați pentru obținerea acestei dinamici sînt corespunzători dinamicii bistabile și se ia în considerare o singură variabilă, ϕ_{DL} .

Oscilații periodice și tranziția spre haos spațiotemporal

Luînd în considerare și a doua variabilă (concentrația protonilor în fața electrodului de lucru), pentru valori corespunzătoare ale parametrilor, sistemul prezintă un comportament periodic (fig. 8.8 a).

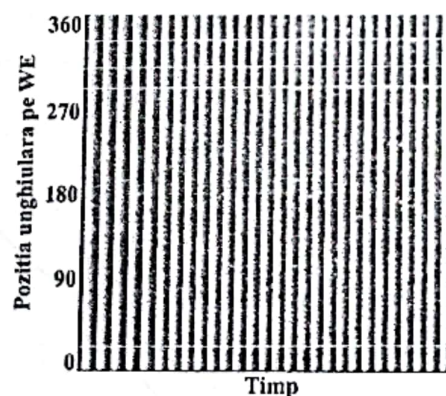


Fig. 8.8 a

Parametrul care este modificat pentru a realiza tranziția spre haos spațiotemporal este lungimea electrodului de lucru, L . Dacă electrodul de lucru are o lungime mică, raza de acțiune a cuplajului electric este comparabilă cu lungimea electrodului și toate punctele de pe electrod vor oscila în fază (fig. 8.8 a). Electrodul devine succesiv activ sau pasiv și curentul total este periodic. Așa cum am văzut, la creșterea lui L raza de acțiune a cuplajului electric scade. Ca urmare, cuplajul electric devine local: diversele

regiuni de pe electrodul de lucru tind să evolueze necorelat și dinamica devine neregulată (fig. 8.8 b și c).

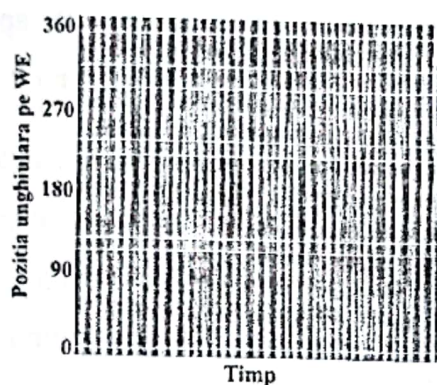


Fig. 8.8 b

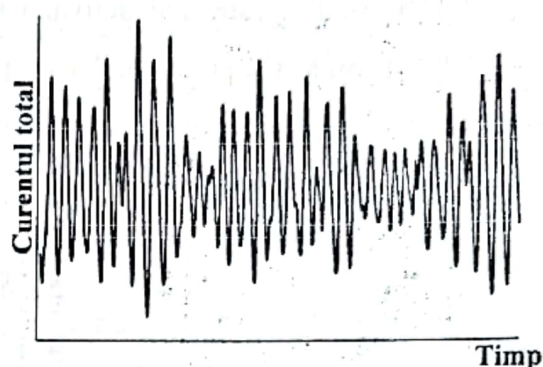


Fig. 8.8 c

Crescând în continuare L , dinamica devine complet haotică (fig. 8.8 d și e). Acest scenariu de tranziție spre haosul spațiotemporal a fost descris în ultimul paragraf al capitoului 6. Este de remarcat că, deși în sistemul uniform spațial oscilațiile sînt periodice, în sistemul extins spațial apare tranziția spre haos, tocmai datorită extinderii spațiale a sistemului.

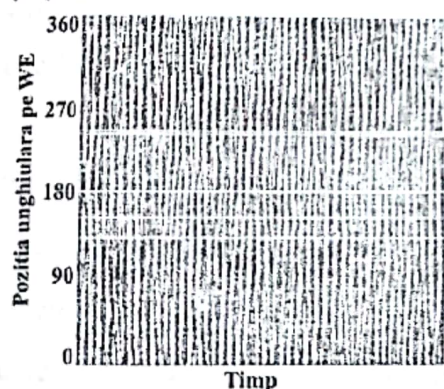


Fig. 8.8 d

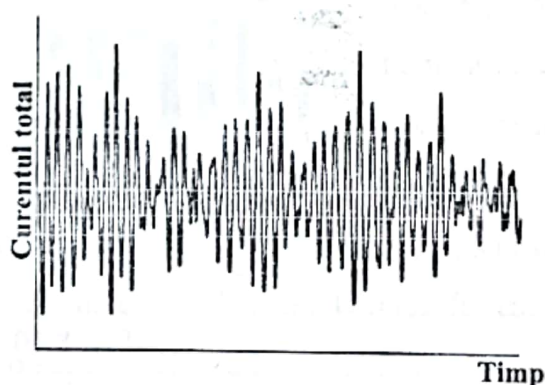


Fig. 8.8 e

Puls rotitor și oscilații în antifază

Comportamentele dinamice prezentate în fig. 8.9 și 8.10 au fost obținute în varianta tridimensională a geometriei din fig. 8.4, în care electrodul de lucru și contraelectrodul sînt circulare, celula electrochimică are geometrie cilindrică iar electrodul de referință se află pe axa cilindrului, în apropierea contraelectrodului [33]. Fig. 8.9 a prezintă un puls rotitor: o regiune activă se propagă cu viteză constantă de-a lungul electrodului. Datorită condițiilor periodice la frontieră, propagarea pulsului poate continua un timp oricît de lung. Fig. 8.9 b prezintă curentul total: după un anumit

tranzient (nereprezentat în fig. 8.9 a), curentul tinde la o valoare constantă, corespunzătoare comportamentului asimptotic. Fig. 8.10 prezintă oscilații în antifază: jumătate a electrodului este mai activă, iar cealaltă jumătate este mai pasivă, apoi situația se inversează. Curentul total este periodic în timp. Atât pulsul rotitor cât și oscilațiile în antifază sînt manifestări ale cuplajului negativ.

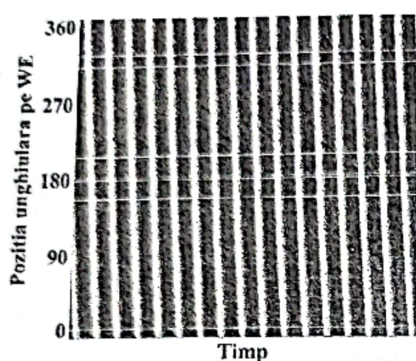


Fig. 8.9 a

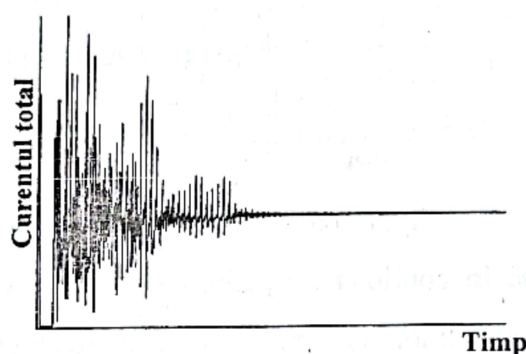


Fig. 8.9 b

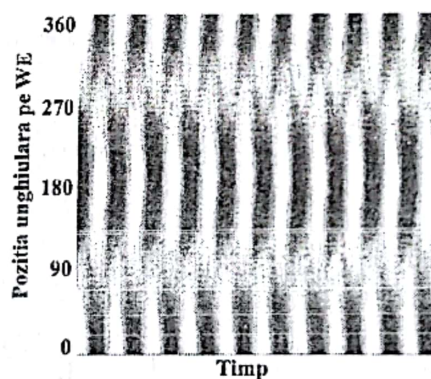


Fig. 8.10

Ca o concluzie generală, apare necesitatea studierii efectului extinderii spațiale în sistemele electrochimice ce prezintă o dinamică neliniară; curentul total oferă doar o imagine globală a proceselor care au loc la electrodul de lucru. În cazul sistemelor experimentale, urmărirea doar a curentului total, fără a studia spațiotemporal procesele care au loc la electrod, poate conduce la concluzii eronate privind dinamica de electrod [29,30].

9. Clasificarea oscilatorilor chimici după mecanismul lor de reacție

Reacțiile chimice oscilante pot prezenta o mare varietate de comportamente, cum sînt oscilațiile periodice de tip ciclu limită, bifurcațiile cu dublarea perioadei, cuasiperiodicitatea și haosul. Totuși, în general, toți oscilatorii chimici, indiferent de speciile chimice pe care le conțin, într-un anumit domeniu al parametrilor de control, evoluează după un ciclu limită de periodicitate simplă. Evident, pentru ca acest comportament comun să apară, mecanismele reacțiilor oscilante trebuie să satisfacă anumite cerințe.

În acord cu M. Eiswirth, A. Freund și J. Ross [37,38], oscilațiile periodice simple se pot explica prin prezența în mecanismele de reacție a unor subsisteme de reacții chimice la care participă anumite tipuri de specii chimice. Autorii citați mai sus au găsit patru clase de oscilatori chimici, care diferă prin tipul de ansamblu de reacții chimice, responsabile de apariția comportamentului periodic de tip ciclu limită, atunci cînd constrîngerile ce acționează asupra sistemului o permit. Aceste patru clase de oscilatori chimici se grupează în două categorii, așa cum vom arăta în paragraful 9.5.

În studiile lor, Eiswirth et al. au utilizat analiza *rețelelor de reacție* (engl. 'stoichiometric network analysis', SNA) elaborată de B. L. Clarke [39]. În cadrul acestei analize, mecanismele de reacție sunt reprezentate diagramatic, sub forma unor rețele care conectează diferitele specii chimice (vezi fig 9.8). O rețea de reacții chimice este instabilă dacă prezintă cel puțin o stare staționară instabilă într-o anumită regiune din spațiul parametrilor de constrîngere. Dacă, însă, oricare ar fi valorilor parametrilor de constrîngere, toate stările staționare ale sistemului chimic sînt stabile, rețeaua de reacții chimice este stabilă.

Avînd în vedere că la baza clasificării oscilatorilor chimici stă analiza rețelelor chimice (SNA), în prima parte a acestui capitol se va prezenta pe scurt teoria lui Clarke. Deoarece în analiza stabilității rețelelor chimice, speciile chimice care nu sînt variabile dinamice nu prezintă importanță, aceste specii chimice vor fi omise. De exemplu, în locul reacției chimice



în care apar două variabile dinamice (X și Y) ale sistemului de reacții chimice, se va scrie pseudoreacția



9.1. Con de curenți și curenți extremi

Pentru a identifica cărei clase îi aparține un oscilator chimic, se realizează diagrama curenților său instabil dominant. Noțiunea de *curent* a fost folosită pentru prima oară în legătură cu mecanisme de reacție în analiza rețelelor chimice (SNA) [39]. În această analiză se pleacă de la condiția de stare staționară

$$\frac{d\bar{X}}{dt} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{dx_i}{dt} = 0 \quad (i = \overline{1, n}) \quad (9.2)$$

unde $\bar{X} = (x_1 \ x_2 \ \dots \ x_i \ \dots \ x_n)^T$ este vectorul coloană al concentrațiilor speciilor chimice ce reprezintă variabilele dinamice ale sistemului chimic luat în considerație. Din (9.2) rezultă

$$\underline{v}(\bar{k}, \bar{X}) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \sum_{\rho=1}^r \underline{v}_{i\rho} v_{\rho}(\bar{k}, \bar{X}) = 0 \quad i = \overline{1, n} \quad (9.3)$$

unde $\underline{v}$ este matricea coeficienților stoechiometrici ai speciilor chimice ce reprezintă variabile dinamice, în cele r reacții chimice

$$\underline{v} = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \dots & v_{1r} \\ v_{21} & v_{22} & \dots & v_{2r} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ v_{n1} & v_{n2} & \dots & v_{nr} \end{pmatrix} \quad (9.4)$$

$\bar{v} = (v_1 \ v_2 \ \dots \ v_{\rho} \ \dots \ v_r)^T$ reprezintă vectorul coloană al vitezelor de reacție, iar $\bar{k} = (k_1 \ k_2 \ \dots \ k_r)$ este vectorul linie al constantelor de viteză. Soluțiilor, $\bar{v}(\bar{k}, \bar{X})$, ale sistemului de ecuații liniare (9.3) li se impune, bineînțeles, condiția

$$v_{\rho}(\bar{k}, \bar{X}) \geq 0 \quad (\rho = \overline{1, r}) \quad (9.5)$$

Deoarece relația (9.3) este similară legii lui Kirchhoff pentru curenții electrici, Clarke numește soluțiile sale, $\bar{v}$, *curenți*. Fiecărui curent, $\bar{v}$, îi corespunde o buclă de reacție (vezi aplicația 9.2. de la sfârșitul acestei secțiuni).

Mulțimea soluțiilor sistemului format din ecuațiile (9.3) și inegalitățile (9.5) formează, în spațiul r dimensional al vitezelor de reacție, un con, numit *con de curent* și notat cu C_v . Conul de curent reprezintă, deci, mulțimea

$$C_v \equiv \{\vec{v} \in R_+^r | \vec{v}\vec{v} = 0\} \quad (9.6)$$

Sistemul de ecuații (9.3) este subdeterminat, deoarece conține d ecuații independente ($d = \text{rang } v \leq n$) și r necunoscute. Deducem că numai $r-d$ necunoscute ale acestui sistem sînt independente. În consecință, conul curenților, C_v , este de dimensiune $r-d$.

Totalitatea vitezelor de reacție, $\{v_\rho\}_{\rho=1, \overline{r}}$, formează un ansamblu de coordonate în semispațiul R_+^r . Conul de curent, C_v , este constituit dintr-o infinitate de semidrepte care pornesc din originea acestui sistem de coordonate. Un exemplu simplu de con de curent este dat în fig. 9.1.

Oricare curent, $\vec{v} \in C_v$, poate fi exprimat sub forma

$$\vec{v} = \lambda \vec{v}' \quad (9.7)$$

unde $\lambda = \sum_{\rho=1}^r v_\rho \geq 0$. Relația (9.7) implică

$$\sum_{\rho=1}^r v'_\rho = 1 \quad (9.8)$$

Din (9.3), (9.5) și (9.7) rezultă

$$\begin{cases} \vec{v}\vec{v}' = 0 \\ v'_\rho \geq 0, \rho = \overline{1, r} \end{cases} \quad (9.9)$$

Vectorul $\vec{v}'$ reprezintă, deci, tot un curent ($\vec{v}' \in C_v$). Invers, oricare ar fi curentul

$\vec{v}' \in C_v$ astfel încît $\sum_{\rho=1}^r v'_\rho = 1$, un vector oarecare, $\vec{v}$, dat de $\vec{v} = \lambda \vec{v}'$, unde $\lambda \geq 0$, va

reprezenta tot un curent, deoarece satisface condițiile (9.3) și (9.5). În concluzie, toți curenții (toate punctele care aparțin conului C_v) se pot obține prin multiplicarea soluțiilor pozitive, $\vec{v}'$, ale sistemului de mai jos, cu numere $\lambda \geq 0$

$$\begin{cases} \underline{v}\vec{v} = 0 \\ \sum_{p=1}^r v_p = 1 \end{cases} \quad (9.10)$$

Sistemul (9.10) poate fi scris sub o formă compactă

$$B\vec{v} = \underline{b} \quad (9.11)$$

unde matricea B se obține prin adăugarea, sub d linii independente ale matricei stoechiometrice $\underline{v}$, a unei linii formate numai din elementul unitate

$$B = \begin{pmatrix} v_{\alpha(1)1} & v_{\alpha(1)2} & \dots & v_{\alpha(1)r} \\ v_{\alpha(2)1} & v_{\alpha(2)2} & \dots & v_{\alpha(2)r} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ v_{\alpha(d)1} & v_{\alpha(d)2} & \dots & v_{\alpha(d)r} \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (9.12)$$

În (9.12) indicii $\alpha(1), \alpha(2), \dots, \alpha(d)$ sînt numere din mulțimea $\{1, 2, \dots, n\}$. Cu $\underline{b}$ s-a notat, în (9.11), vectorul coloană $(0 \ 0 \ \dots \ 0 \ 1)^T \in \mathbb{R}^{d+1}$.

Fie $\vec{v}'$ o soluție pozitivă a sistemului (9.11), deci un punct, P , din conul de curent, C_v . Oricare multiplu pozitiv, $\lambda \vec{v}'$, al acestei soluții, se va găsi pe semidreapta care trece prin origine (vîrfurile conului) și punctul P . Deoarece la toți curenții $\lambda \vec{v}'$ ($\lambda > 0$) de pe o semidreaptă a conului de curent le corespunde aceeași buclă de reacție, pentru a obține totalitatea buclelor de reacție pentru un anumit sistem chimic, se poate folosi sistemul de ecuații (9.11) în locul sistemului (9.3). Dar, chiar și sistemul (9.11), constituit din r necunoscute și $d+1$ ecuații independente, în loc de d ecuații independente cîte are sistemul (9.3), este, în general, subdeterminat ($r > d+1$). Pentru a simplifica problema, cu ajutorul sistemului de ecuații (9.11) se determină așa numiții curenți extremi. Aceștia se găsesc pe semidreptele care reprezintă muchiile conului de curent și, de aceea, au fiecare un număr de $r-d-1$ componente nule. Dacă se consideră egale cu zero $r-d-1$ componente ale vectorului vitezelor, $\vec{v}$, celelalte $d+1$ componente se pot determina din cele $d+1$ ecuații independente ale sistemului (9.11). Soluția sistemului va reprezenta, evident, un curent extrem numai dacă valorile obținute pentru aceste $d+1$ viteze de reacție sînt mai mari sau egale cu zero.

Deoarece conul de curent, C_v , are dimensiunea $r-d$, el nu poate prezenta un

număr, f , de muchii mai mic decât $r-d$

$$f \geq r-d \quad (9.13)$$

În plus, numărul, f , de curenți extremi ce se găsesc fiecare pe altă muchie nu are cum să fie mai mare decât numărul de combinații de r elemente luate câte $r-d-1$, C_r^{r-d-1} , prin care se selectează $r-d-1$ componente ale vectorului vitezelor, $\vec{v}$, în scopul de a le egala cu zero

$$f \leq C_r^{r-d-1} \quad (9.14)$$

Practic, numărul f este întotdeauna mai mic decât numărul de combinații, deoarece nu toate modalitățile de selecție diferită a celor $r-d-1$ viteze de reacție conduc la un sistem compatibil, care să prezinte o soluție pozitivă.

Conul de curenț, C_v , fiind un poliedru convex [39], toți curenții săi se pot exprima sub forma

$$\vec{v} = E\vec{j} \quad (9.15)$$

În relația de mai sus E reprezintă o matrice ale cărei coloane sînt f curenți extremi ce se găsesc pe muchii diferite, E_ℓ ($\ell = \overline{1, f}$)

$$E = (E_1 \ E_2 \ \dots \ E_f) = \begin{pmatrix} v_{11}^e & v_{12}^e & \dots & v_{1f}^e \\ v_{21}^e & v_{22}^e & \dots & v_{2f}^e \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ v_{r1}^e & v_{r2}^e & \dots & v_{rf}^e \end{pmatrix} \quad (9.16)$$

Cu $\vec{j}$ s-a notat în (9.15) vectorul coloană $(j_1 \ j_2 \ \dots \ j_f)^T \in R_+^f$.

Pentru fiecare curenț extrem se poate scrie o "bucă extremă" de reacție. Acestea reprezintă subrețele care respectă condiția de stare staționară și care nu pot fi descompuse în subrețele formate dintr-un număr și mai mic de reacții, fără a intra în contradicție cu (9.2) [40].

Se poate remarca faptul că, între teoria lui Clarke și metoda lui Horiuti [1], există unele asemănări. Astfel, componentele curenților reprezintă, în metoda lui Horiuti, numere stoechiometrice. De asemenea, buclele de reacție, conform terminologiei folosite de Horiuti, sînt *căi de reacție*.

Aplicația 9.1

Vom determina curenții extremi pentru modelul de mai jos, format din patru pseudoreacții



Matricea stoechiometrică a singurei specii chimice ce reprezintă o variabilă dinamică, X , este

$$\underline{v} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}\tag{9.18}$$

Matricea $\underline{v}$ dată de (9.18) are rangul $d=1$. Pentru modelul (9.17), dimensiunea conului de curenți, C_v , va fi deci $r-d=4-1=3$. Un con de curenți tridimensional prezintă un număr de muchii $f \geq 3$. Curenții extremi sînt soluții ale sistemului de ecuații (9.11) care, în acest caz, devine

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}}_B \underbrace{\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \end{pmatrix}}_{\underline{\tilde{v}}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}}_{\underline{b}} \Leftrightarrow \begin{cases} v_1 + v_2 - v_3 - v_4 = 0 \\ v_1 + v_2 + v_3 + v_4 = 1 \end{cases}\tag{9.19}$$

Pentru a determina curenții extremi, se consideră nule cîte $r-d-1=2$ componente ale vectorului vitezelor, $\underline{\tilde{v}}$. Numărul total de modalități de selecție diferită a două elemente din patru este șase. Însă numai patru combinații conduc la sisteme de ecuații compatibile

$$(1) \quad v_1 = v_3 = 0 \Rightarrow \begin{cases} v_2 - v_4 = 0 \\ v_2 + v_4 = 1 \end{cases} \Rightarrow v_2 = v_4 = 1/2$$

$$(2) \quad v_1 = v_4 = 0 \Rightarrow \begin{cases} v_2 - v_3 = 0 \\ v_2 + v_3 = 1 \end{cases} \Rightarrow v_2 = v_3 = 1/2$$

$$(3) \quad v_2 = v_3 \Rightarrow v_1 = v_4 = 1/2$$

$$(4) \quad v_2 = v_4 = 0 \Rightarrow v_1 = v_3 = 1/2$$

Am obținut deci $f = 4$ curenți extremi, ce se găsesc fiecare pe altă muchie a conului de curent. Oricare multiplu pozitiv, λE_ℓ ($\lambda > 0$), al unui curent extrem, E_ℓ ($\ell = \overline{1,4}$), constituie însă tot un punct extrem de pe aceeași muchie a conului de curent. Pentru a simplifica reprezentarea diagramatică a buclelor “extreme” de reacție, analiza rețelelor chimice (SNA) folosește curenții extremi formați din numere întregi și mici, care nu au nici un divizor comun. Bineînțeles, aceasta implică multiplicarea cu un număr strict pozitiv a soluțiilor sistemului de ecuații (9.11). În cazul modelului (9.17), toate cele patru soluții ale sistemului (9.19) se înmulțesc cu 2. Curenții extremi rezultați sînt coloanele, E_ℓ ($\ell = \overline{1,4}$), ale matricei

$$E = (E_1 \ E_2 \ E_3 \ E_4) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (9.20)$$

În ceea ce privește conul de curent, C_v , acesta nu poate fi decît o piramidă deoarece este tridimensional și are $f = 4$ muchii. Din (9.20) se deduce că această piramidă este pătratică.

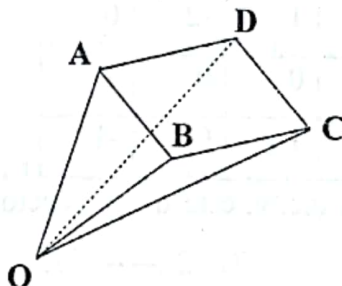
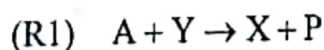
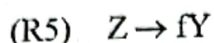
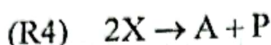
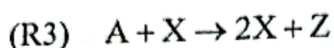
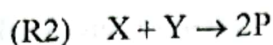


Fig 9.1

Aplicația 9.2: Oregonatorul

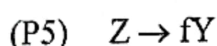
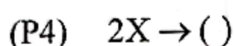
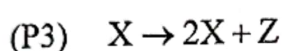
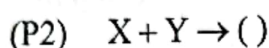
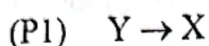
Modelul denumit Oregonator a fost elaborat în 1974, de către Field și Noyes. Cu ajutorul acestui model simplu se poate descrie calitativ comportamentul periodic de tip ciclu limită prezentat de reacția Belousov – Zhabotinski (reacția de oxidare a acidului malonic sau a altor acizi organici cu KBrO_3 în mediu de acid sulfuric diluat, reacție catalizată de ioni metalici cu valență variabilă cum sînt ionii Ce^{3+} , Mn^{2+} ș.a.). Modelul reacțional este:





În reacțiile (R1)-(R5), s-au folosit notațiile: $A = [\text{BrO}_3^-]$, $X = [\text{HBrO}_2]$, $Y = [\text{Br}^-]$,

$Z = 2[\text{Ce}^{4+}]$ și $P = [\text{HOBr}]$. Pseudoreacțiile Oregonatorului sînt



Pentru $f=1$, se formează următoarea matrice a coeficienților stoechiometrici ai speciilor chimice intermediare X, Y și Z

	R1	R2	R3	R4	R5
X	1	-1	1	-2	0
Y	-1	-1	0	0	1
Z	0	0	1	0	-1

(9.21)

Rangul matricei stoechiometrice, v , este $d = 3$. Vectorul coloană al vitezelor de reacție are $r = 5$ elemente

$$\vec{v} = (v_1 \quad v_2 \quad v_3 \quad v_4 \quad v_5)^T \quad (9.22)$$

Rezultă că avem un con de curenți, C_v , de dimensiune $r - d = 5 - 3 = 2$.

Pentru Oregonator, matricea B se formează prin adăugarea unei linii de 1 sub liniile matricei stoechiometrice (9.21). Sistemul de ecuații (9.11) va prezenta numai două soluții care sînt curenți extremi. În urma înmulțirii cu un număr pozitiv a fiecărei dintre aceste soluții, astfel încît multiplii lor să fie formați din numere întregi ce nu prezintă nici un divizor comun, se obține următoarea matrice a curenților extremi

$$E = (E_1 \ E_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (9.23)$$

Totalitatea curenților Oregonatorului formează un con de curent bidimensional, cu $f = 2$ muchii. Prin secționarea transversală a acestui con se formează un triunghi.

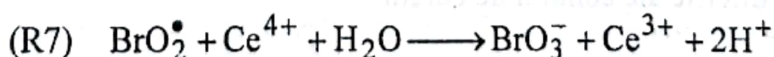
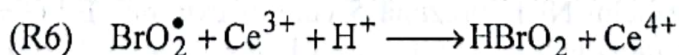
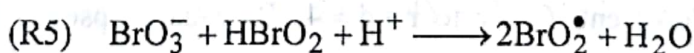
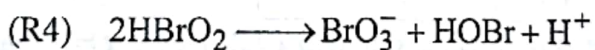
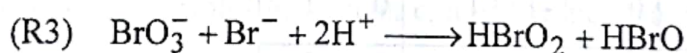
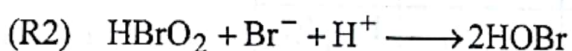
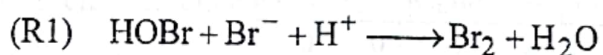
Buclele de reacție determinate de curenții extremi, E_1 și E_2 , din matricea (9.23) sînt

$$E_1 \Rightarrow (R2 + R3 + R5) \quad (9.24)$$

$$E_2 \Rightarrow (R1 + R3 + R4 + R5) \quad (9.25)$$

Aplicația 9.3: Mecanismul NFT (oscilatorul minim de tip bromat)

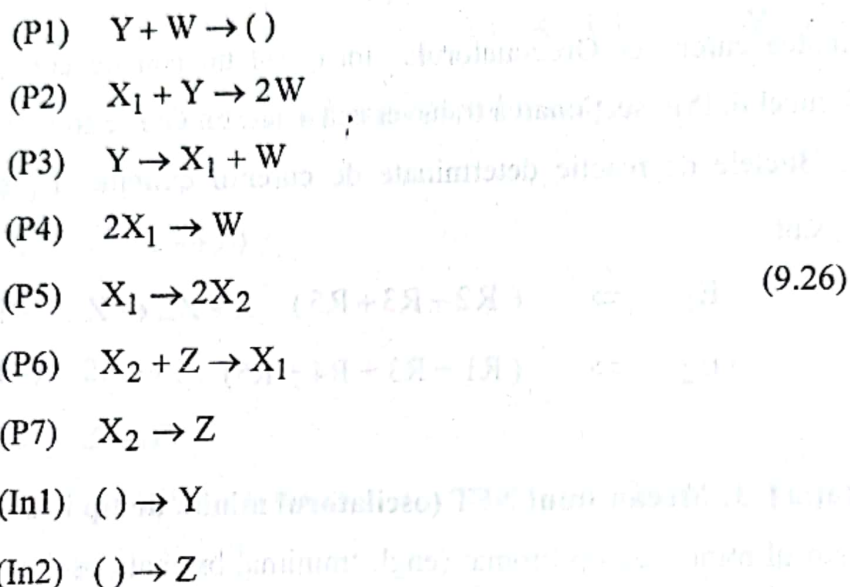
Oscilatorul minim de tip bromat (engl. 'minimal bromate oscillator') a fost descoperit în 1981 de Bar-Eli, care a alimentat cu ionii BrO_3^- , Br^- , Ce^{3+} și cu H_2SO_4 un reactor de tip CSTR. Mecanismul Noyes-Field-Thompson (NFT) este constituit din următoarele 7 reacții chimice [21]



Deși în reacțiile de mai sus apar 10 specii chimice, comportamentul periodic al oscilatorului minim de tip bromat poate fi explicat calitativ cu ajutorul a cinci specii:

$X_1 = \text{HBrO}_2$, $X_2 = \text{BrO}_2^\bullet$, $Y = \text{Br}^-$, $Z = \text{Ce}^{3+}$ și $W = \text{HOBr}$. În continuare, vom

considera reacțiile (R1) – (R7) ireversibile. Corespunzător acestor 7 reacții chimice, avem cele 7 pseudoreacții de mai jos, (P1) – (P7), sub care au fost reprezentate schematic fluxurile la intrarea în reactor ale speciilor chimice Br^- și Ce^{3+} , (In1), respectiv (In2).



Matricea stoechiometrică a speciilor esențiale, $\underline{v}$, este

	P1	P2	P3	P4	P5	P6	P7	In1	In2
X_1	0	-1	1	-2	-1	1	0	0	0
X_2	0	0	0	0	2	-1	-1	0	0
Y	-1	-1	-1	0	0	0	0	1	0
Z	0	0	0	0	0	-1	1	0	1
W	-1	2	1	1	0	0	0	0	0

(9.27)

Deoarece numărul de procese din rețeaua chimică (9.26) este $r=9$, iar $\text{rang } \underline{v} = 5$, dimensiunea conului de curent, C_v , este $r-d=4$. Rețeaua de pseudoreacții (9.26), corespunzătoare mecanismului NFT, prezintă 5 curenți extremi, E_ℓ ($\ell = \overline{1,5}$), ce se găsesc pe muchii diferite ale conului de curent

$$E^T = \begin{array}{c|ccccccccc} & P1 & P2 & P3 & P4 & P5 & P6 & P7 & In1 & In2 \\ \hline E_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ E_2 & 1 & 0 & 0 & 1 & 2 & 4 & 0 & 1 & 4 \\ E_3 & 3 & 0 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 \\ E_4 & 2 & 1 & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & 3 & 2 \\ E_5 & 3 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 \end{array} \quad (9.28)$$

Pentru mecanismul NFT avem un con de curent, C_v , tetradimensional, cu $f = 5$ muchii.

9.2. Reprezentarea diagramatică a rețelelor și curenților chimici

În analiza rețelelor chimice (SNA) mecanismele de reacție sînt prezentate sub forma *diagramelor de rețea* (engl. 'network diagrams', D_N) [39,40]. Într-o diagramă de rețea, speciile chimice sînt conectate prin săgeți corespunzătoare reacțiilor sau pseudoreacțiilor chimice (de multe ori rețelele se construiesc pe baza pseudoreacțiilor). Un exemplu este diagrama rețelei chimice a oscilatorului minim de tip bromat din fig. 9.8, în care s-au folosit notațiile din aplicația 9.3. În această diagramă, atît stoechiometria, cît și cinetica celor șapte pseudoreacții chimice ale mecanismului NFT sînt puse în evidență cu ajutorul segmentelor de dreaptă de la capetele săgeților. Numărul total de segmente de dreaptă din coada unei săgeți, T , reprezintă coeficientul stoechiometric al reactantului în reacția chimică respectivă, iar numărul de segmente din vârful săgeții, B , coeficientul stoechiometric al produsului de reacție către care este orientată săgeata. De exemplu, o săgeată de tipul $X \xrightarrow{\quad\quad\quad} \gg Y$ indică pseudoreacția chimică $2X \rightarrow 4Y$. Numărul de segmentele din coadă poziționate în partea stîngă reprezintă ordinul de reacție al reactantului respectiv. Astfel, în exemplul ales, ordinul de reacție al speciei chimice X este unu, chiar dacă coeficientul său stoechiometric este doi. Dacă, atît coeficientul stoechiometric, cît și ordinul de reacție al unui reactant sînt unu, nu se mai reprezintă nici un segment de dreaptă în coada săgeții. De exemplu, săgeata $X \longrightarrow Y$ dintr-o diagramă de rețea, corespunde pseudoreacției chimice $X \rightarrow 2Y$. Dacă o pseudoreacție chimică implică mai mulți reactanți și produși, aceasta va fi reprezentată

în diagrama de rețea printr-o săgeată cu mai multe capete. Astfel, pseudoreacția $X + Y \rightarrow Z + W$ va fi reprezentată prin



În fig. 9.2 se dă diagrama de rețea, D_N , pentru pseudoreacțiile Oregonatorului, în cazul $f = 1$ (vezi secțiunea 9.1). Numerele indică pseudoreacțiile (P1) – (P5).

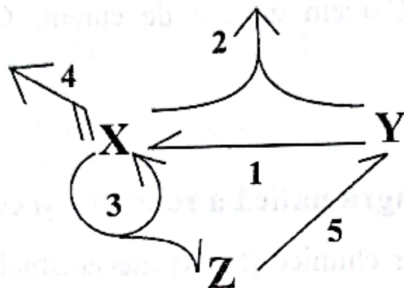


Fig. 9.2

O diagramă de curent, D_C , este o diagramă de rețea, D_N , care prezintă proprietatea că, pentru oricare specie chimică, X_i ($i = \overline{1, n}$), din diagramă, suma tuturor segmentelor din coada săgeților care pornesc de la specia X_i egalează suma segmentelor din vîrfurile săgeților orientate către X_i

$$\sum_{\rho=1}^r T(X_i) = \sum_{\rho=1}^r B(X_i) \quad i = \overline{1, n} \quad (9.29)$$

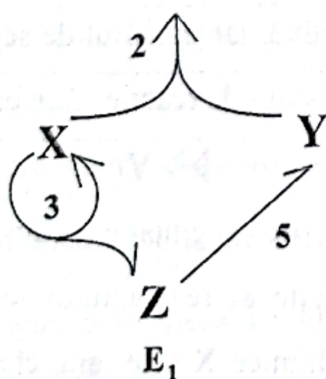


Fig 9.3 a

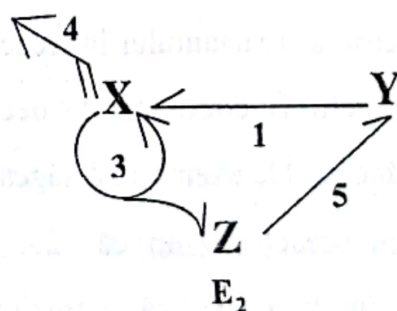


Fig. 9.3 b

Sistemul de ecuații (9.29) este echivalent cu sistemul (9.3), care reprezintă condiția de stare staționară. Diagramele de curent ale subrețelelor “extreme” (buclelor “extreme” de reacție) sînt numite diagrame de curent extrem și se notează cu D_{EC} [39,40]. În fig. 9.3 sînt prezentate diagramele pentru cei doi curenți extremi, E_1 și E_2 , ai

Oregonatorului (vezi (9.23)). Se poate remarca faptul că buclele "extreme" de reacție, reprezentate diagramatic în fig. 9.3, se obțin ușor prin "ștergerea" pseudoreacțiilor (P1) și (P4), respectiv a pseudoreacției (P2) din diagrama de rețea a Oregonatorului, din fig. 9.2.

9.3. Analiza stabilității rețelelor chimice

O rețea chimică este instabilă dacă conține cel puțin un curent instabil [39]. În studiul stabilității unui curent, $\vec{v} = E\vec{j} = \sum_{\ell=1}^f E_{\ell} j_{\ell}$, se pornește de la următoarea matrice

$$V(j) = - \sum_{\ell=1}^f j_{\ell} \cdot \underline{v}(E_{\ell}) \cdot \underline{k}^T \quad (9.30)$$

unde $\vec{j} = (j_1 \ j_2 \ \dots \ j_{\ell} \ \dots \ j_f)^T \in R_+^f$, iar $\underline{v}(E_{\ell}) = [v_{ip}(E_{\ell})]_{\substack{i=1,\dots,n \\ p=1,r}}$ și reprezintă matricea coeficienților stoechiometrici totali, ai speciilor chimice ce sînt variabile dinamice, în curentul extrem E_{ℓ} ($\ell = \overline{1, f}$). În (9.30) s-a notat cu

$$\underline{k}^T = [k_{pi}]_{\substack{p=1,r \\ i=1,n}}$$

transpusa matricei ordinelor parțiale de reacție.

Pentru fiecare $i \in [1, n]$, fie $A(n, i)$ setul tuturor vectorilor care conțin drept componente i numere întregi distincte, $\gamma(1), \gamma(2), \dots, \gamma(i)$, alese din cele n numere întregi $1 \dots n$. Numărul vectorilor din mulțimea $A(n, i)$ este dat de numărul de combinații de n elemente luate câte i . Corespunzător fiecărui vector linie $\vec{\gamma} = (\gamma(1) \ \gamma(2) \ \dots \ \gamma(i))$ se realizează un determinant notat cu $\beta_i(\vec{\gamma}, \vec{j})$

$$\beta_i(\vec{\gamma}, \vec{j}) = \begin{vmatrix} V_{\gamma(1)\gamma(1)} & V_{\gamma(1)\gamma(2)} & \dots & V_{\gamma(1)\gamma(i)} \\ V_{\gamma(2)\gamma(1)} & V_{\gamma(2)\gamma(2)} & \dots & V_{\gamma(2)\gamma(i)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ V_{\gamma(i)\gamma(1)} & V_{\gamma(i)\gamma(2)} & \dots & V_{\gamma(i)\gamma(i)} \end{vmatrix} \quad (9.31)$$

Un curent, E_j , este instabil, dacă există un număr întreg $i \in [1, n]$ și un vector $\gamma \in A(n, i)$ astfel încît să avem un determinant $\beta_i(\vec{\gamma}, \vec{j}) < 0$.

Aplicația 9.4 Analiza stabilității curenților extremi ai Oregonatorului

Pentru Oregonator, matricea ordinelor parțiale de reacție ale variabilelor dinamice, X, Y și Z, notată $\underline{k}$, este

	P1	P2	P3	P4	P5
X	0	1	1	2	0
Y	1	1	0	0	0
Z	0	0	0	0	1

(9.32)

Curentul extrem E_1 reprezintă curentul, $E \vec{j} = (E_1 \ E_2) \begin{pmatrix} j_1 \\ j_2 \end{pmatrix}$, pentru care

$$\vec{j} = \begin{pmatrix} j_1 \\ j_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (9.33)$$

În cazul acestui curent, matricea (9.30) devine

$$V(j) = -[j_1 \underline{v}(E_1) + j_2 \underline{v}(E_2)] k^T = -\underline{v}(E_1) k^T \quad (9.34)$$

Deoarece

$$\underline{v}(E_1) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (9.35)$$

rezultă că

$$V(j) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (9.36)$$

Să calculăm determinanții $\beta_i(\vec{\gamma}, \vec{j})$ ($i = \overline{1,3}$), pentru care vectorul j este dat de (9.33).

Pentru $i=1$, $\gamma = \gamma(1)$ și există trei astfel de determinanți

$$\gamma(1)=1 \quad \Rightarrow \quad \beta_1^1 = V_{11}(\vec{j}) = 0$$

$$\gamma(1)=2 \quad \Rightarrow \quad \beta_1^2 = V_{22}(\vec{j}) = 1$$

$$\gamma(1)=3 \quad \Rightarrow \quad \beta_1^3 = V_{33}(\vec{j}) = 1$$

Pentru $i=2$, însă, unul dintre cei trei determinanți $\beta_2^q(\vec{\gamma}, \vec{j})$ ($q = 1,2,3$), este negativ

$$\bar{\gamma} = (\gamma_1 \quad \gamma_2) = (1 \quad 2) \Rightarrow \beta_2^1(\bar{\gamma}, \bar{j}) = \begin{vmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = -1 < 0$$

Pentru $i = 3$, există un singur determinant β_i , ce nu este negativ

$$\bar{\gamma} = (\gamma(1) \quad \gamma(2) \quad \gamma(3)) = (1 \quad 2 \quad 3) \Rightarrow \beta_3 = \det[V(\bar{j})] = 0$$

Faptul că unul dintre determinanții β_i ai curentului E_1 este negativ ($\beta_2^1 < 0$), ne indică acest curent drept o sursă de instabilitate pentru rețeaua de reacții a Oregonatorului.

În ceea ce privește curentul extrem E_2 , nu prezintă nici un determinant β_i negativ și este, deci, un curent stabil. Deoarece, însă, curentul E_1 este instabil, modelul denumit Oregonatorul prezintă o stare staționară instabilă într-o anumită regiune a spațiului parametrilor.

9.4. Cicluri ireversibile de curent

În general, o rețea chimică nu poate fi instabilă dacă nu conține un ciclu de curent ireversibil [39]. Printr-un ciclu de curent ireversibil se înțelege o succesiune ireversibilă de reacții chimice prin care, în final, se ajunge din nou la specia de la care s-a plecat. În fig 9.4, sînt indicate prin linii îngroșate cele două cicluri ireversibile de curent din diagramele de curent extrem ale Oregonatorului.

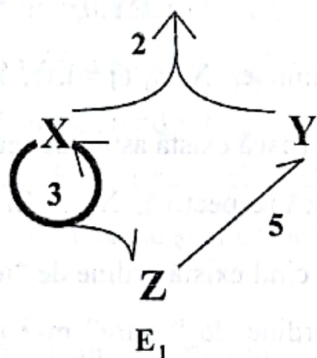


Fig. 9.4 a

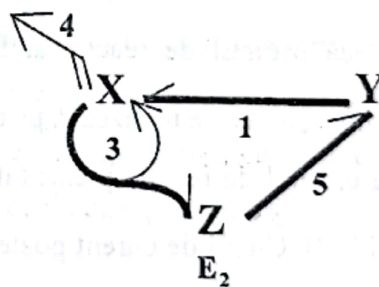


Fig. 9.4 b

Ciclurile ireversibile de curent din diagramele de curent extrem ale Oregonatorului sînt ciclul ce conține numai specia chimică X (1-ciclu), care apare în ambii curenți extremi, E_1 și E_2 , și ciclu care apare doar în curentul E_2 , fiind constituit din cele trei specii chimice, X, Y și Z (3-ciclu). După cum se remarcă și în fig. 9.4, pentru a satisface condiția de staționaritate (9.2), un ciclu ireversibil de curent

trebuie să prezinte o reacție de "ieșire", din care rezultă produși care nu sînt incluși în ciclul respectiv.

Se spune că un i-ciclu de curent, $X_{\gamma(1)}, X_{\gamma(2)}, \dots, X_{\gamma(i)}, X_{\gamma(1)}$, este "puternic", "critic" sau "slab" dacă $\beta_1(\vec{\gamma}, \vec{j}) < 0$, $\beta_1(\vec{\gamma}, \vec{j}) = 0$ sau, respectiv, $\beta_1(\vec{\gamma}, \vec{j}) > 0$. În cazul cel mai simplu, ciclul de curent este un 1-ciclu (o reacție autocatalitică). Un 1-ciclu de curent este "puternic", "critic" sau "slab" dacă $\beta_1 < 0$, $\beta_1 = 0$ sau, respectiv, $\beta_1 > 0$. Diagramele celor trei tipuri de 1-cicluri ireversibile de curent sînt prezentate în fig 9.5: (a) "slab" ($\beta_1 = 2$); (b) "critic" ($\beta_1 = 0$) și (c) "puternic" ($\beta_1 = -1$).

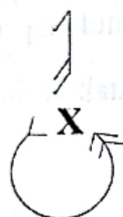


Fig. 9.5 a

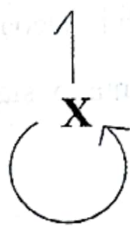


Fig. 9.5 b

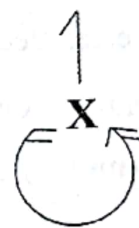
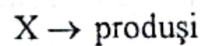
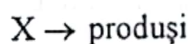
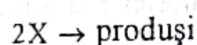
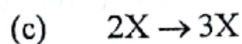
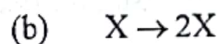
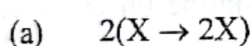


Fig. 9.5 c

Acestora le corespund transformările



Prin comparația unor anumite ordine parțiale de reacție din interiorul ciclului cu unele din reacțiile de ieșire din ciclu, se poate identifica cărui tip (slab, critic sau puternic) îi aparține un i-ciclu. Un i-ciclu ireversibil de curent, $X_{\gamma(1)}, \dots, X_{\gamma(i)}$, este critic dacă ordinul de reacție al fiecărei specii chimice, $X_{\gamma(j)}$ ($j = \overline{1, i}$), în oricare reacție de ieșire ce se realizează prin intermediul său (dacă există astfel de reacții), este egal cu ordinul de reacție prezentat de specia chimică respectivă, $X_{\gamma(j)}$, în interiorul ciclului [39]. Ciclul de curent poate fi, însă, "slăbit" când există ordine de "ieșire" mai mari decât ordinul ciclului și "întărit" dacă sînt ordine de "ieșire" mai mici decât ordinul ciclului. De exemplu, pentru 1-ciclurile de curent din fig. 9.5, ordinul de ieșire și ordinul ciclului au următoarele valori: (a) 1-ciclu slab (2,1); (b) 1-ciclu critic (1,1); (c) 1-ciclu puternic (1,2). Conform analizei de mai sus, 1-ciclul ireversibil de curent al Oregonatorului este critic pentru diagrama de curent extrem E_1 și slab pentru diagrama de curent extrem E_2 .

Ciclurile puternice reprezintă întotdeauna o sursă de instabilitate pentru rețelele chimice, cele slabe nu pot conduce la instabilitate iar ciclurile critice sînt o cauză a instabilității stărilor staționare numai dacă, în curenții în care apar, mai există și alt tip de reacție chimică. În analiza rețelilor chimice (SNA) se distig următoarele tipuri de rețele instabile, ce diferă prin cauza internă a instabilității lor:

- 1) rețele chimice care conțin un ciclu critic de curent cu o reacție de ieșire destabilizatoare;
- 2) rețele chimice care prezintă un ciclu puternic de curent;
- 3) rețele care au două cicluri critice de curent, dintre care unul conține cel puțin patru specii chimice în plus față de celălalt.

Nu este exclusă posibilitatea existenței și a altor clase de rețele chimice instabile.

9.5. Clasificarea oscilatorilor chimici

Pornind de la tipurile (1) și (2) de rețele instabile, Eiswirth *et al.* [37,38,41] și-au propus să clasifice oscilatorii chimici simpli în funcție de ciclul ireversibil de curent ce determină instabilitatea stării staționare și apariția oscilațiilor periodice de tip ciclu limită. Printr-un oscilator simplu se înțelege un oscilator ce conține un singur ciclu de curent ce nu este slab, adică prezintă o singură cauză internă a instabilității. Analiza rețelilor chimice, care a fost prezentată în secțiunile anterioare, caută condițiile pe care trebuie să le îndeplinească mecanismele de reacție pentru a fi posibilă instabilitatea stărilor staționare în anumite regiuni ale spațiului parametrilor de constrîngere. Aceste condiții, însă, nu coincid întotdeauna cu cele în care sistemul chimic evoluează după un ciclu limită. Pentru ca rețelele chimice să prezinte oscilații periodice simple este necesar, uneori, să existe și alte tipuri de reacții chimice, la care participă și alte specii chimice.

Deși oscilatorii chimici implică, în general, un număr mare de specii chimice, numai unele dintre acestea sînt necesare pentru a explica calitativ comportamentul oscilant care este generat de o bifurcație Hopf. Speciile chimice sînt esențiale pentru apariția oscilațiilor dacă, atunci cînd concentrațiile lor se mențin constante, nici concentrațiile celorlalte specii nu mai oscilează. În schimb, speciile chimice, ale căror concentrații pot fi menținute constante fără ca aceasta să determine dispariția

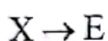
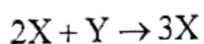
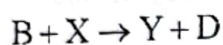
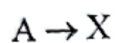
bifurcației Hopf și, în consecință, a comportamentului oscilant, sînt denumite *specii neesențiale*. Identificarea speciilor neesențiale este utilă pentru a putea clasifica oscilatorii chimici în funcție doar de speciile lor esențiale și de procesele chimice la care participă acestea.

9.5.1. Specii chimice neesențiale

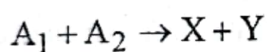
Speciile chimice neesențiale se clasifică în:

a) *Reactanți care conduc la specii chimice esențiale*

Un exemplu este specia notată cu A din modelul trimolecular (Brusselatorul)



Teoretic, speciile chimice neesențiale din această clasă pot participa și la reacții de tipul



În reacția de mai sus A_1 și A_2 reprezintă specii neesențiale de tip (a), iar X și Y specii esențiale. Totuși, în cazul sistemelor chimice experimentale, nu s-au găsit, încă, exemple de specii chimice neesențiale din clasa (a).

b) *Prođuși inerți și specii chimice intermediare care joacă rolul de reactanți în reacții chimice ce nu sînt relevante pentru comportamentul periodic de tip ciclu limită.*

Un exemplu de specie chimică neesențială de tip (b) este bromul, Br_2 , din mecanismul Noyes-Field-Thompson (NFT) utilizat de Bar-Eli în modelarea oscilatorului minim de tip bromat (vezi reacțiile (R1)-(R7) din aplicația 9.3). Luînd în considerare și reacțiile inverse, Br_2 reprezintă o specie chimică intermediară. Totuși, bromul poate deveni un produs nereactiv dacă prin reactor trece un flux de gaz inert cum este azotul, de viteză suficient de mare pentru a îndepărta din sistem specia chimică Br_2 înainte ca aceasta să disproporționeze în speciile chimice esențiale $HOBr$ și Br^- . Oscilațiile periodice nu încetează, însă, în urma trecerii prin sistem a fluxului de gaz inert. În concluzie, Br_2 este o specie chimică neesențială de tip (b)

pentru mecanismul NFT.

c) *Specii chimice care reacționează cu cel puțin o specie esențială și ale căror concentrații nu se schimbă semnificativ în timpul oscilațiilor periodice de tip ciclu limită.*

Aceste specii chimice, ale căror concentrații rămân aproape constante în timpul oscilațiilor periodice, au fost denumite de Clarke specii externe [39,40]. Exemple de specii chimice de tip (c) sînt ionii H^+ și BrO_3^- din mecanismul Noyes-Field-Thompson (NFT).

Pentru oscilațiile chimice periodice din sistemele închise, speciile chimice care apar în amestecul reactant inițial sînt, în general, specii neesențiale, de tip c. De asemenea, unele specii chimice care se introduc continuu într-un reactor de tip CSTR sînt specii neesențiale din clasa c.

Deoarece speciile neesențiale nu ne ajută în explicarea calitativă a apariției oscilațiilor periodice de tip ciclu limită, acestea nu vor figura în diagramele de rețea care stau la baza clasificării oscilatorilor chimici. Corespunzător primelor două tipuri de rețele instabile, prezentate în secțiunea 9.4., există două categorii de oscilatori chimici.

9.5.2. Categoria 1: Oscilatori care conțin cicluri critice de curent

Acești oscilatori aparțin tipului (1) de rețele chimice instabile. Oscilatorii din această categorie pot prezenta stări staționare instabile datorită “destabilizării” ciclului critic de curent (CCC) printr-o reacție de ieșire de tipul celei din fig. 9.6.

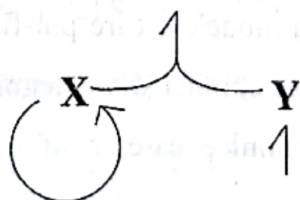
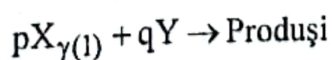


Fig. 9.6

În general, dacă se combină un i-ciclu, format din setul de i specii chimice $\Sigma = \{X_{\gamma(1)} \dots X_{\gamma(i)}\}$, cu o reacție de ieșire de forma generală



unde $p, q > 0$, iar produșii nu aparțin setului Σ , determinantul β_{i+1} , scris pentru ansamblul $\{Y\} \cup \Sigma$, de $i+1$ specii chimice, este negativ [39]. Diagrama de curent extrem din fig. 9.6 conține două tipuri de specii chimice esențiale, X și Y, numite specii autocatalitice, respectiv specii de ieșire. Oscilațiile periodice de tip ciclu limită pot apărea, însă, numai dacă mecanismul de reacție conține și un al treilea tip de specie chimică esențială, Z. Categoria 1 de oscilatori chimici prezintă două subcategorii, care diferă prin modul în care apar în sistemul chimic speciile chimice de tip Y și Z:

- oscilatori din subcategoria 1B

Un oscilator chimic din această subcategorie prezintă întotdeauna un curent extrem instabil, a cărui diagramă este constituită din cele trei tipuri de specii chimice esențiale, X, Y, și Z. În această diagramă, specia de ieșire Y se formează în urma unui lanț de reacții ce pornesc din interiorul ciclului, în care există cel puțin un intermediar de tip Z (fig. 9.7).

- oscilatori din subcategoria 1C

Pentru oricare oscilator din subcategoria 1C se poate realiza o diagrama de curent extrem instabil în care apare și o specie chimică esențială de tip Z, ce este consumată de ciclul critic de curent (fig. 9.10, 9.11 b și fig. 9.12). Această subcategorie de oscilatori chimici se divide în două subclase, 1CW și 1CX. În cazul oscilatorilor de tip 1CW, spre deosebire de cei din subclasa 1CX, în diagrama curentului extrem instabil există și un al patrulea tip de specii chimice esențiale, notat cu W. Specia chimică W se produce prin reacția de ieșire care destabilizează ciclul de tip CCC și reacționează cu specii esențiale de tip Y (vezi fig. 9.10).

În continuare, vom prezenta modelele care pot fi considerate drept prototipuri ale diferitelor subclase de oscilatori chimici din categoria 1 și, pentru fiecare dintre acestea, se vor căuta procesele chimice care, conform lui Tyson [42], determină instabilitatea unei stări staționare în anumite domenii de valori ale parametrilor de constrângere. În studiul său, Tyson pornește de la forma generală a sistemului de ecuații diferențiale de evoluție temporală a unui sistem chimic reactant

$$\frac{dx_i}{dt} = F_i(\{x_i\}, \{k_p\}, \{\lambda_j\}) \quad i = \overline{1, n}; \quad p = \overline{1, r}; \quad j = \overline{1, m} \quad (9.37)$$

unde x_i reprezintă concentrația speciei chimice X_i , k_p constanta de viteză a reacției ρ ($\rho = \overline{1, r}$) și λ_j ($j = \overline{1, m}$) alți parametrii de constrângere decât cei incluși în constantele de viteză. Matricea Jacobiană a sistemului de ecuații (9.37),

$A = [a_{ij}]_{i,j=\overline{1,n}}$, are drept elemente $a_{ij} = \left(\frac{\partial F_i}{\partial x_j} \right)$. Cu ajutorul acesteia, Tyson găsește

următoarele procese chimice care determină instabilitatea sistemelor de reacții chimice:

a) autocataliza directă,

$$a_{ii} > 0, i \in [1, n];$$

b) autocataliză indirectă, cu subclasele

b1) competiție,

$$a_{ij} < 0, a_{ji} < 0, i, j \in [1, n], i \neq j;$$

b2) simbioză,

$$a_{ij} > 0, a_{ji} > 0, i, j \in [1, n], i \neq j;$$

b3) feedback pozitiv,

$$a_{ij}a_{jk} \dots a_{qi} > 0 \text{ (pentru cel puțin trei indici diferiți } i, j \text{ și } k \in [1, n])$$

c) feedback negativ

$$a_{ij}a_{jk} \dots a_{qi} < 0 \text{ (pentru cel puțin trei indici diferiți } i, j \text{ și } k \in [1, n])$$

9.5.2.1. Subcategoria de oscilatori chimici 1B

Pentru subcategoria 1B drept prototip este Oregonatorul, a cărui diagramă de rețea, D_N , a fost dată în paragraful 9.2 (fig. 9.2). În fig. 9.7, apare diagrama curentului extrem instabil, E_1 , al Oregonatorului, care este constituită din următoarele specii esențiale: $X = \text{HBrO}_2$, $Y = \text{Br}^-$ și $Z = 2\text{Ce}^{4+}$.

Să căutăm procesele chimice care, conform clasificării lui Tyson, determină instabilitatea stărilor staționare ale Oregonatorului într-o anumită regiune a spațiului parametrilor de constrângere. Pentru $f=1$, ecuațiile diferențiale care redau evoluția temporală a speciilor esențiale ale Oregonatorului, X , Y și Z , în variabile adimensionale, sînt

$$\frac{dx}{d\tau} = s(y - xy + x - qx^2) \quad (9.39)$$

$$\frac{dy}{d\tau} = s^{-1}(-y - xy + z) \quad (9.40)$$

$$\frac{dz}{d\tau} = w(x - z) \quad (9.41)$$

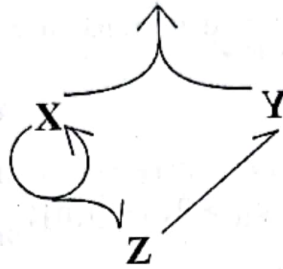


Fig. 9.7

Sistemul descris de ecuațiile (9.39)-(9.41) admite starea staționară nebanală

$$x_{SS} = z_{SS} = \frac{-q + \sqrt{q^2 + 8q}}{2q}, \quad y_{SS} = \frac{x_{SS}}{1 + x_{SS}} \quad (9.42)$$

Matricea Jacobiană este de forma

$$A = \begin{pmatrix} a_{xx} & a_{xy} & a_{xz} \\ a_{yx} & a_{yy} & a_{yz} \\ a_{zx} & a_{zy} & a_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} - & - & 0 \\ - & - & + \\ + & 0 & - \end{pmatrix} \quad (9.43)$$

Instabilitatea calitativă a stărilor staționare se datorează competiției $[(a_{xy} \ a_{yx}) = (- \ -)]$ dintre specia chimică X (HBrO_2) și specia Y (Br^-) față de specia neesențială BrO_3^- și procesului de feedback negativ $[(a_{zx} \ a_{xy} \ a_{yz}) = (+ \ - \ +)]$, realizat prin intermediul speciei chimice Z (Ce^{4+}). Același tip de competiție, între specii esențiale de tip X și de tip Y, îl prezintă toți oscilatorii din categoria 1. În ceea ce privește procesul de feedback negativ în speciile esențiale, de forma $a_{zx}a_{xy}a_{yz} < 0$, este comun tuturor oscilatorilor din subcategoria 1B. Din acest motiv, speciile chimice de tip Z sunt denumite specii feedback [37,38].

9.5.2.2. Subcategoria de oscilatori chimici 1C

9.5.2.2.1. Clasa 1CW

Prototipul clasei 1CW este oscilatorul minim de tip bromat, descris de mecanismul NFT. Rețeaua chimică pentru mecanismul NFT a fost dată în paragraful 9.1. și este formată din pseudoreacțiile (P1) – (P7) și fluxurile ionilor Br^- și Ce^{3+} la intrarea în reactor, In_1 , respectiv In_2 . Speciile chimice esențiale sînt: HBrO_2 și $\text{BrO}_2^\bullet$ de tip X (notate cu X_1 și respectiv X_2), Br^- de tip Y, Ce^{3+} de tip Z și HBrO de tip W. Rețeaua chimică a acestui oscilator poate fi prezentată sub forma diagramei din fig. 9.8.

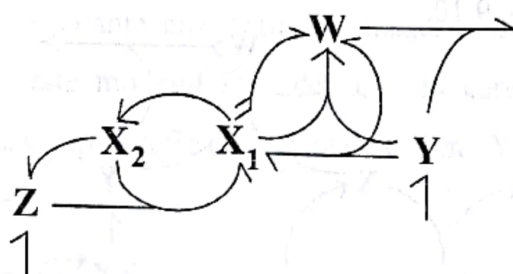


Fig. 9.8

După cum s-a arătat în paragraful 9.1, avem $f = 5$ curenți extremi (coloanele matricei E din ecuația (9.28)). Diagramele acestor curenți extremi, D_{EC} , sînt date în figura de mai jos.

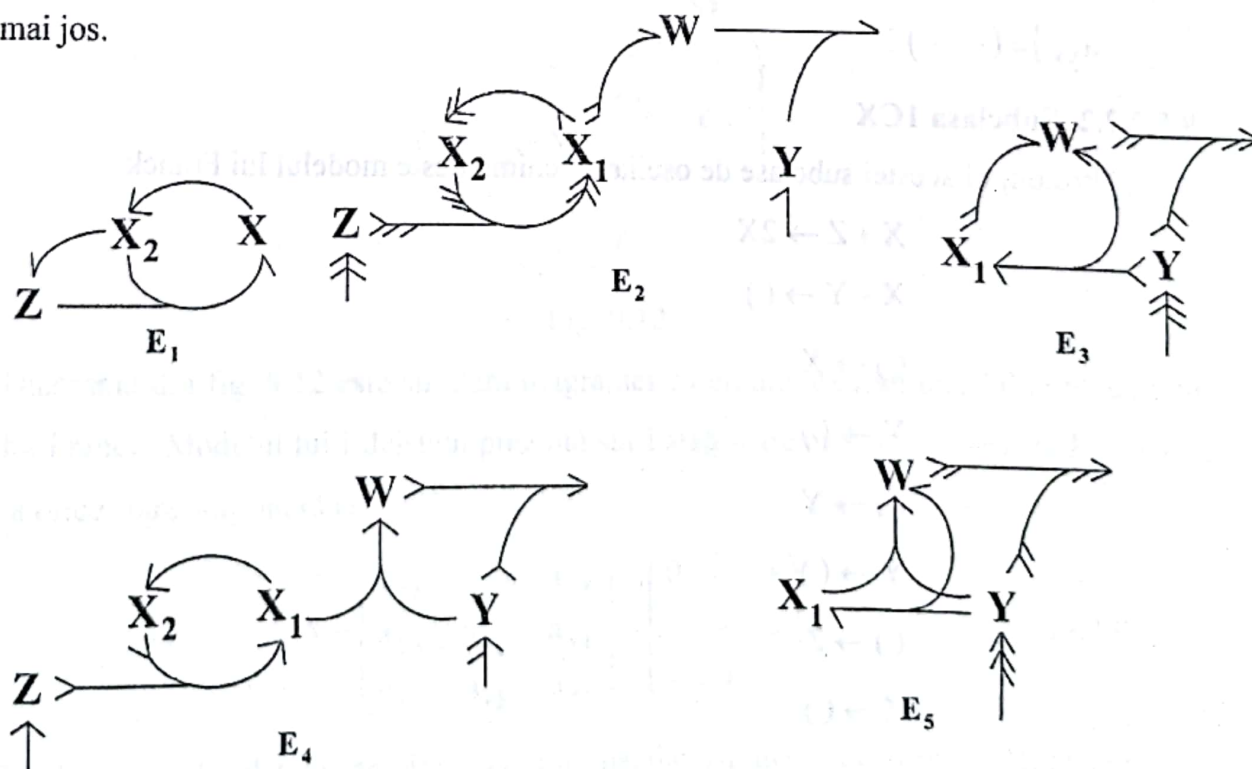


Fig. 9.9

Se remarcă faptul că diagrama E_1 conține un ciclu critic de curent care nu este destabilizat, diagrama E_2 are un ciclu slab de curent (ordinul de ieșire al speciei X_1 este 2, pe cînd ordinul de reacție a speciei X_1 în interiorul ciclului este 1) iar în diagramele E_3 și E_5 nu există cicluri de curent. Diagrama curentului extrem E_4 conține, însă, un ciclu critic de curent destabilizat prin reacția dintre specia X_1 și Y . Deoarece am realizat o diagrama de curent extrem instabil în care apar specii chimice esențiale de tip X , Y , Z și W , oscilatorul minim de tip bromat se încadrează în clasa 1CW. Efectuînd $(P5)+2(P6)$, diagrama curentului extrem instabil, E_4 , se aduce la forma simplificată din fig. 9.10.

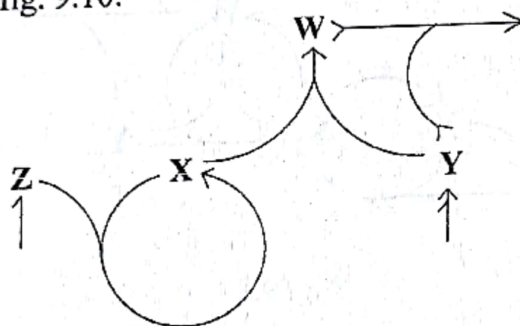
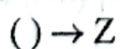
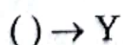
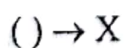
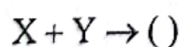
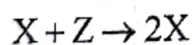


Fig. 9.10

Rețeaua de reacții din fig. 9.10 prezintă fenomenul de competiție, $(a_{xy} \ a_{yx}) = (- \ -)$.

9.5.2.2.2. Subclasa 1CX

Prototipul acestei subclase de oscilatori chimici este modelul lui Franck



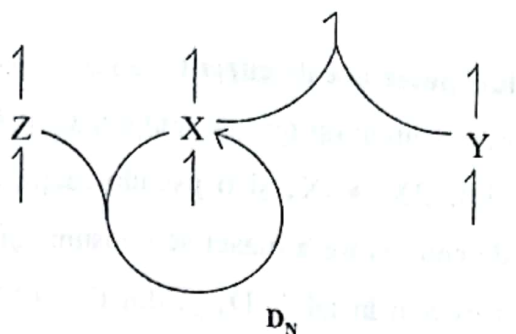


Fig. 9.11 a

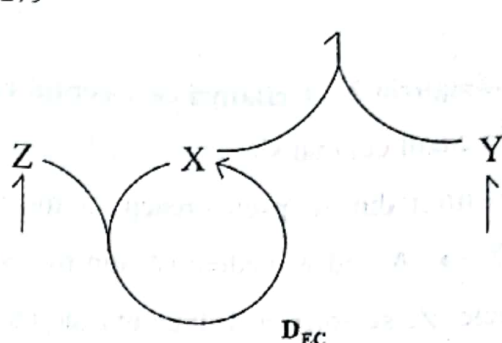
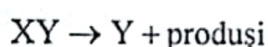
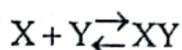
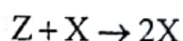


Fig. 9.11 b

În Fig. 9.11 apar (a) diagrama de rețea, D_N și (b) diagrama curentului extrem instabil, D_{EC} , pentru modelul lui Franck.

Subliniem faptul că atât unele modele simplificate, cât și anumite mecanisme realiste ale unor reacții oscilante enzimatică se încadrează în categoria 1 sau 2 de oscilatori. Un exemplu este modelul lui Edelstein, în care specia X se reproduce autocatalitic din sursa Z , ca apoi să fie degradată de enzima Y [42].



Pentru modelul de mai sus, se poate realiza următoarea diagramă de curent extrem:

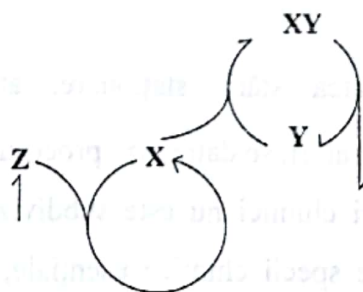


Fig. 9.12

Diagrama din fig. 9.12 este similară diagramei curentului extrem instabil al modelului lui Franck. Modelul lui Edelstein prezintă stări staționare multiple. Matricea Jacobiană la orice stare staționară este:

$$A = \begin{pmatrix} a_{xx} & a_{xy} & a_{xz} \\ a_{yx} & a_{yy} & a_{yz} \\ a_{zx} & a_{zy} & a_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & - & + \\ - & - & 0 \\ - & 0 & - \end{pmatrix} \quad (9.44)$$

Modelul lui Edelstein prezintă, ca toți oscilatorii din categoria 1, fenomenul de competiție între specia autocatalitică, X , și specia de ieșire, Y [$(a_{xy} \ a_{yx}) = (- \ -)$].

9.5.3. Categoria 2: Oscilatori care conțin cicluri puternice de curent

În cazul cel mai simplu, un ciclul puternic de curent (strong current cycle, SCC) este constituit dintr-o pseudoreacție autocatalitică, $2X \rightarrow 3X$, și o pseudoreacție de ieșire, $X \rightarrow$. Avînd în vedere că, din motive de conservare a masei se consumă și o altă specie, Z, se formează diagrama de curent extrem instabil, D_{EC} , din fig. 9.13. Aceasta reprezintă totodată diagrama de rețea, D_{EC} , a modelului lui Sel'kov [37], care poate fi, deci, considerat un oscilator din categoria 2, cu un singur curent. Acest model simplu a fost realizat de Sel'kov pentru a descrie calitativ oscilațiile glicolitice.

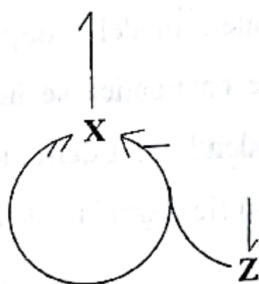


Fig. 9.13

Pentru modelul lui Sel'kov, la stare staționară, matricea Jacobiană are forma

$$A = \begin{pmatrix} - & - \\ + & + \end{pmatrix} \quad (9.45)$$

Deoarece $a_{22} > 0$, instabilitatea stării staționare, atunci cînd parametrii de constrîngere trec peste anumite valori, se datorează procesului de autocataliză directă.

Categoria 2 de oscilatori chimici nu este subdivizată. Oscilatorii din această categorie conțin două tipuri de specii chimice esențiale, X și Z. Deoarece chiar și ciclurile puternice de curent (SCC) cu numai două specii chimice esențiale pot conduce la oscilații periodice de tip ciclu limită, multe modele abstracte aparțin categoriei 2 de oscilatori. Drept exemple de modele ce prezintă doar două specii esențiale sînt modelul Sel'kov și Brusselatorul. Un model cu mai multe specii chimice în ciclul puternic de curent (X, EX, EX_2, EX_2Z) este cel din fig. 9.14, elaborat pentru hidroliza α -N-benzoil-L-argininei catalizată de enzima papaina [37]. În fig. 9.14, s-a notat cu Z substratul inițial, cu E enzima și cu X specia ce activează enzima. EX și EX_2 reprezintă complexii enzimă-activator iar EX_2Z complexul

enzimă-activator-substrat. Acest ultim model poate fi considerat o versiune mai detaliată a modelului lui Sel'kov.

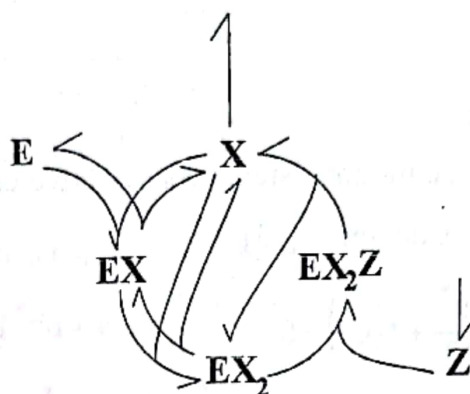


Fig. 9.14

Ciclurile de tip SCC sînt rare în cazul mecanismelor realiste ale oscilatorilor din mediu omogen și izoterm. În mecanismele reacțiilor oscilante de cataliză eterogenă, însă, ciclurile puternice de curent apar ori de cîte ori viteza de adsorbție a unei molecule prezintă un ordin mai mare decît unu în situri de adsorbție vacante. De asemenea, oscilatorii termocinetici, pentru care temperatura este variabilă, se încadrează în categoria 2 [37].

10. Metode perturbabile utilizate în rezolvarea aproximativă a ecuațiilor neliniare de evoluție

10.1. Ecuația Duffing

Oscilațiile libere ale multor sisteme conservative cu un singur grad de libertate sînt guvernate de o ecuație de forma [43]

$$\frac{d^2 x^*}{dt^{*2}} + f(x^*) = 0 \quad (10.1)$$

unde f este o funcție neliniară de coordonata x^* . Aici $d^2 x^* / dt^{*2}$ este accelerația sistemului, iar $f(x^*)$ este forța de revenire. Fie $x^* = x_0^*$ poziția de echilibru a sistemului. Atunci $f(x_0^*) = 0$. Mai mult, presupunem că f este funcție analitică în $x^* = x_0^*$. Dezvoltînd în serie Taylor în vecinătatea echilibrului, rezultă

$$f(x^*) = k_1(x^* - x_0^*) + k_2(x^* - x_0^*)^2 + \dots$$

unde am notat

$$k_n = \frac{1}{n!} \frac{d^n f^*}{dx^{*n}}(x_0^*)$$

Ecuația de evoluție (10.1) poate fi rescrisă [43]

$$\frac{d^2 x^*}{dt^{*2}} + k_1(x^* - x_0^*) + k_2(x^* - x_0^*)^2 + k_3(x^* - x_0^*)^3 + \dots = 0 \quad (10.2)$$

Ecuația (10.2) descrie mișcarea sistemului în vecinătatea poziției de echilibru. Fie $u^* = x^* - x_0^*$ abaterea sistemului față de poziția de echilibru. Cu această notație, (10.2) devine

$$\frac{d^2 u^*}{dt^{*2}} + k_1 u^* + k_2 u^{*2} + k_3 u^{*3} + \dots = 0$$

Considerăm cazul particular

$$\frac{d^2 u^*}{dt^{*2}} + k_1 u^* + k_3 u^{*3} = 0 \quad (10.3)$$

unde $k_1 > 0$, iar k_3 poate fi pozitiv sau negativ. Aceasta reprezintă ecuația Duffing [43]. Adimensionalizăm această ecuație. Fie U^* o lungime caracteristică a mișcării și T^* un timp caracteristic. Notăm

$$t = \frac{t^*}{T^*} \text{ și } u = \frac{u^*}{U^*} \quad (10.4)$$

Înlocuind variabilele adimensionale (10.4) în ecuația de evoluție (10.3), se obține

$$\ddot{u} + k_1 T^{*2} u + k_3 T^{*2} U^{*2} u^3 = 0 \quad (10.5)$$

Alegem timpul caracteristic T^* încât $k_1 T^{*2} = 1$; notăm $\varepsilon = k_3 T^{*2} U^{*2} = k_3 U^{*2} / k_1$.

Cu aceste notații, ecuația de evoluție în variabile adimensionale, (10.5), poate fi rescrisă

$$\ddot{u} + u + \varepsilon u^3 = 0 \quad (10.6)$$

ε este un parametru adimensional, măsură a neliniarității. Pentru specificarea completă a problemei, mai trebuie cunoscută condiția inițială

$$\begin{cases} u(0) = x_0 \\ \dot{u}(0) = \dot{x}_0 \end{cases} \quad (10.7)$$

10.2. Dezvoltarea directă

Cînd $\varepsilon = 0$, ecuația (10.6) se reduce la ecuația oscilatorului liniar armonic,

$$\ddot{u} + u = 0$$

cu soluția

$$u_0 = a_0 \cos(t + \beta_0) \quad (10.8)$$

unde a_0 și β_0 sînt constante arbitrare. Cînd ε este mic dar nenul, soluția ecuației (10.6) nu mai este de forma (10.8). Căutăm soluția sub forma unei serii de puteri ale lui ε

$$u(t; \varepsilon) = u_0(t) + \varepsilon u_1(t) + \varepsilon^2 u_2(t) + \dots \quad (10.9)$$

Dezvoltarea de ordinul I este

$$u(t; \varepsilon) = u_0(t) + \varepsilon u_1(t) + O(\varepsilon^2) \quad (10.10)$$

Înlocuind (10.10) în (10.6), se obține

$$\ddot{u}_0 + \varepsilon \ddot{u}_1 + O(\varepsilon^2) + u_0 + \varepsilon u_1 + O(\varepsilon^2) + \varepsilon [u_0 + \varepsilon u_1 + O(\varepsilon^2)]^3 = 0 \quad (10.11)$$

Deoarece ε este arbitrar, ecuația (10.11) se reduce la un sistem de ecuații diferențiale, corespunzătoare diferitelor puteri ale lui ε . Pentru $O(\varepsilon^0 = 1)$ și $O(\varepsilon)$, avem

$$\begin{cases} \ddot{u}_0 + u_0 = 0 \\ \ddot{u}_1 + u_1 + u_0^3 = 0 \end{cases} \quad (10.12)$$

Soluția primei ecuații din sistemul (10.12) este

$$u_0 = a \cos(t + \beta) \quad (10.13)$$

Înlocuind (10.13) în a doua ecuație din (10.12), se obține

$$\ddot{u}_1 + u_1 = -a^3 \cos^3(t + \beta) = -\frac{3}{4}a^3 \cos(t + \beta) - \frac{1}{4}a^3 \cos(3t + 3\beta) \quad (10.14)$$

O soluție particulară a ecuației (10.14) este [43]

$$u_1 = -\frac{3}{8}a^3 t \sin(t + \beta) + \frac{1}{32}a^3 \cos(3t + 3\beta) \quad (10.15)$$

Cu (10.13) și (10.15), soluția (10.10) devine

$$u = a \cos(t + \beta) + \varepsilon a^3 \left[-\frac{3}{8}t \sin(t + \beta) + \frac{1}{32} \cos(3t + 3\beta) \right] + \dots \quad (10.16)$$

În prima aproximație

$$u = a \cos(t + \beta) \quad (10.17)$$

iar prima corecție este

$$-\frac{3}{8}a^3 \varepsilon t \sin(t + \beta) + \frac{1}{32} \varepsilon a^3 \cos(3t + 3\beta) \quad (10.18)$$

Corecția este mică numai când $\varepsilon t \ll 1$. Când $\varepsilon t = O(1)$, corecția devine de ordinul de mărime al termenului principal. Rezultă că dezvoltarea directă (10.10) este valabilă numai pentru timpi care satisfac $\varepsilon t < O(1) \Leftrightarrow t < O(\varepsilon^{-1})$. Spunem că astfel de dezvoltări sînt neuniforme (sau eșuează) pentru timpi lungi. Motivul acestui comportament este termenul de forma $t \sin(t + \beta)$, numit termen secular (denumire împrumutată din astronomie) [43].

10.3. Tehnica Lindstedt-Poincaré

Eșecul dezvoltării directe este datorat faptului că aceasta nu ia în considerare dependența (neliniară) a frecvenței de neliniaritate. Din acest motiv, s-au dezvoltat o serie de tehnici care furnizează dezvoltări uniforme [43]. Introducem transformarea

$$\tau = \omega t \quad (10.19)$$

unde ω este o constantă care depinde de ε . Facem schimbarea de variabilă independentă $t \rightarrow \tau$, cu care ecuația Duffing, (10.6), devine

$$\omega^2 u'' + u + \varepsilon u^3 = 0 \quad (10.20)$$

unde prim indică derivata în raport cu τ . În ecuația (10.20), atât u cât și ω sînt necunoscute. Căutăm soluții aproximative de forma

$$\begin{cases} u = u_0(\tau) + \varepsilon u_1(\tau) + \dots \\ \omega = 1 + \varepsilon \omega_1 + \dots \end{cases} \quad (10.21)$$

Înlocuind dezvoltările (10.21) în (10.20), se obține sistemul

$$\begin{cases} u_0'' + u_0 = 0 \\ u_1'' + u_1 = -u_0^3 - 2\omega_1 u_0'' \end{cases} \quad (10.22)$$

Soluția generală a primei ecuații din sistemul (10.22) este

$$u_0 = a \cos(\tau + \beta) \quad (10.23)$$

O soluție particulară a ecuației a doua din (10.22) este

$$u_1 = \frac{1}{2} \left(2\omega_1 a - \frac{3}{4} a^3 \right) \tau \sin(\tau + \beta) + \frac{1}{32} a^3 \cos(3\tau + 3\beta) \quad (10.24)$$

Expresia (10.24) conține un termen care face dezvoltarea neuniformă. Anulăm acest termen secular

$$2\omega_1 a - \frac{3}{4} a^3 = 0 \Rightarrow \omega_1 = \frac{3}{8} a^2 \quad (10.25)$$

iar (10.24) devine

$$u_1 = \frac{1}{32} a^3 \cos(3\tau + 3\beta) \quad (10.26)$$

Cu (10.23) și (10.26), dezvoltarea de ordinul I (10.21) este

$$\begin{aligned} u &= a \cos(\tau + \beta) + \frac{1}{32} \varepsilon a^3 \cos(3\tau + 3\beta) + \dots \\ \omega &= 1 + \frac{3}{8} \varepsilon a^2 + \dots \end{aligned} \quad (10.27)$$

Înlocuind $\tau = \omega t$ în prima ecuație (10.27), găsim că

$$u = a \cos\left[\left(1 + \frac{3}{8} \varepsilon a^2\right)t + \beta\right] + \frac{1}{32} \varepsilon a^3 \cos\left[3\left(1 + \frac{3}{8} \varepsilon a^2\right)t + 3\beta\right] + \dots \quad (10.28)$$

Dezvoltarea (10.28) este uniformă.

10.4. Metoda renormării

În loc să introducem transformarea $\tau = \omega t$ în ecuația diferențială Duffing (10.6), o introducem în dezvoltarea directă neuniformă (10.16) [43]

$$t = \omega^{-1} \tau = (1 + \varepsilon \omega_1 + \dots)^{-1} \tau = \tau(1 - \varepsilon \omega_1 + \dots) = \tau - \varepsilon \omega_1 \tau + \dots \quad (10.29)$$

Cu aceasta, dezvoltarea directă (10.16) devine

$$\begin{aligned} u &= a \cos(\tau + \beta - \varepsilon \omega_1 \tau + \dots) + \varepsilon a^3 \left[-\frac{3}{8} (\tau - \varepsilon \omega_1 \tau + \dots) \sin(\tau + \beta - \varepsilon \omega_1 \tau + \dots) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{32} \cos(3\tau + 3\beta - 3\varepsilon \omega_1 \tau + \dots) \right] + \dots \end{aligned} \quad (10.30)$$

Dezvoltând în serie Taylor funcțiile trigonometrice în jurul lui $\tau + \beta$, (10.30) devine

$$u = a \cos(\tau + \beta) + \varepsilon \left[\left(\omega_1 a - \frac{3}{8} a^3 \right) \tau \sin(\tau + \beta) + \frac{1}{32} a^3 \cos(3\tau + 3\beta) \right] + \dots \quad (10.31)$$

Anulăm în ecuația precedentă termenul secular mixt

$$\omega_1 a - \frac{3}{8} a^3 = 0 \Rightarrow \omega_1 = \frac{3}{8} a^2 \quad (10.32)$$

iar (10.31) se reduce la

$$u = a \cos(\tau + \beta) + \frac{1}{32} \varepsilon a^3 \cos(3\tau + 3\beta) + \dots \quad (10.33)$$

Deoarece transformarea $\tau = \omega t$ este introdusă în dezvoltarea directă (neuniformă), care apoi este făcută uniformă, această tehnică se numește metoda uniformizării sau normării [43].

10.5. Metoda scalelor multiple

Căutăm soluția ecuației Duffing (10.6) sub forma [43]

$$u(t; \varepsilon) = u(t, \varepsilon t, \varepsilon^2 t, \varepsilon^3 t, \dots; \varepsilon)$$

sau

$$u(t; \varepsilon) = u(T_0, T_1, T_2, T_3, \dots; \varepsilon) \quad (10.34)$$

unde

$$T_0 = t; T_1 = \varepsilon t; T_2 = \varepsilon^2 t; \dots \quad (10.35)$$

T_n reprezintă scale diferite de timp, deoarece ε este un parametru mic. T_0 reprezintă scara de timp rapidă, T_1 o scară mai lentă, T_2 și mai lentă etc. În ecuația Duffing (10.6), facem schimbarea de variabilă independentă

$$t \longrightarrow T_0, T_1, T_2, \dots$$

Cu aceasta, derivatele în raport cu timpul devin

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} &= \frac{\partial}{\partial T_0} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial T_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial T_2} + \dots \\ \frac{d^2}{dt^2} &= \frac{\partial^2}{\partial T_0^2} + 2\varepsilon \frac{\partial^2}{\partial T_0 \partial T_1} + \varepsilon^2 \left(2 \frac{\partial^2}{\partial T_0 \partial T_2} + \frac{\partial^2}{\partial T_1^2} \right) + \dots \end{aligned} \quad (10.36)$$

Cu (10.36), ecuația Duffing (10.6) devine

$$\frac{\partial^2 u}{\partial T_0^2} + 2\varepsilon \frac{\partial^2 u}{\partial T_0 \partial T_1} + \varepsilon^2 \left(2 \frac{\partial^2 u}{\partial T_0 \partial T_2} + \frac{\partial^2 u}{\partial T_1^2} \right) + u + \varepsilon u^3 + \dots = 0 \quad (10.37)$$

Căutăm o soluție aproximativă de forma

$$u = u_0(T_0, T_1, T_2, \dots) + \varepsilon u_1(T_0, T_1, T_2, \dots) + \dots \quad (10.38)$$

Înlocuind (10.38) în ecuația de evoluție (10.37), se obține sistemul

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u_0}{\partial T_0^2} + u_0 = 0 \\ \frac{\partial^2 u_1}{\partial T_0^2} + u_1 = -2 \frac{\partial^2 u_0}{\partial T_0 \partial T_1} - u_0^3 \end{cases} \quad (10.39)$$

Soluția generală a primei ecuații din (10.39) este

$$u_0 = a(T_1, T_2, \dots) \cos[T_0 + \beta(T_1, T_2, \dots)] \quad (10.40)$$

a și β nu sînt constante, ci funcții de scalele lente $T_1, T_2, \dots$. Înlocuind (10.40) în a doua ecuație (10.39), găsim că

$$\frac{\partial^2 u_1}{\partial T_0^2} + u_1 = 2 \frac{\partial a}{\partial T_1} \sin(T_0 + \beta) + \left(2a \frac{\partial \beta}{\partial T_1} - \frac{3}{4} a^3 \right) \cos(T_0 + \beta) - \frac{1}{4} a^3 \cos(3T_0 + 3\beta) \quad (10.41)$$

Eliminăm din (10.41) elementele care duc la apariția termenilor seculari: egalăm cu zero coeficienții lui $\sin(T_0 + \beta)$ și $\cos(T_0 + \beta)$

$$\begin{cases} \frac{\partial a}{\partial T_1} = 0 \\ 2a \frac{\partial \beta}{\partial T_1} - \frac{3}{4} a^3 = 0 \end{cases} \quad (10.42)$$

iar ecuația de evoluție (10.41) devine

$$\frac{\partial^2 u_1}{\partial T_0^2} + u_1 = -\frac{1}{4} a^3 \cos(3T_0 + 3\beta)$$

cu soluția

$$u_1 = \frac{1}{32} a^3 \cos(3T_0 + 3\beta) \quad (10.43)$$

Soluția primei ecuații (10.42) este

$$a = a(T_2, T_3, \dots) \quad (10.44)$$

Din a doua ecuație (10.42), rezultă că

$$\frac{\partial \beta}{\partial T_1} = \frac{3}{8} a^2 \Rightarrow \beta = \frac{3}{8} a^2 T_1 + \beta_0(T_2, T_3, \dots) \quad (10.45)$$

Înlocuind (10.40), (10.43), (10.44) și (10.45) în (10.38), obținem

$$u = a(T_2, T_3, \dots) \cos \left[T_0 + \frac{3}{8} T_1 a^2(T_2, T_3, \dots) + \beta_0(T_2, T_3, \dots) \right] + \frac{1}{32} \epsilon a^3(T_2, T_3, \dots) \cos \left[3T_0 + \frac{9}{8} T_1 a^2(T_2, T_3, \dots) + 3\beta_0(T_2, T_3, \dots) \right] + \dots \quad (10.46)$$

Deoarece depind de scale de timp foarte lente, a și β_0 pot fi considerate constante, iar (10.46) devine

$$u = a \cos \left(T_0 + \frac{3}{8} T_1 a^2 + \beta_0 \right) + \frac{1}{32} \epsilon a^3 \cos \left(3T_0 + \frac{9}{8} T_1 a^2 + 3\beta_0 \right) + O(\epsilon^2 t) \quad (10.47)$$

În termenii variabilei originale, (10.47) devine

$$u = a \cos\left(t + \frac{3}{8}\varepsilon a^2 + \beta_0\right) + \frac{1}{32}\varepsilon a^3 \cos\left(3t + \frac{9}{8}\varepsilon a^2 + 3\beta_0\right) + O(\varepsilon^2 t) \quad (10.48)$$

Dezvoltarea (10.48) nu este valabilă pentru $t \geq O(\varepsilon^{-2})$.

10.6. Metoda variației parametrilor

Cînd $\varepsilon = 0$, soluția ecuației Duffing poate fi scrisă [43]

$$u = a \cos(t + \beta) \quad (10.49)$$

unde a și β sînt constante (parametri). Din (10.49), rezultă că

$$\dot{u} = -a \sin(t + \beta) \quad (10.50)$$

Cînd $\varepsilon \neq 0$, presupunem că soluția ecuației Duffing, (10.6), este tot (10.49) și satisface (10.50), dar a și β sînt funcții de timp. Din acest motiv, metoda se numește a variației parametrilor. Din (10.49) rezultă că

$$\dot{u} = -a \sin(t + \beta) + \dot{a} \cos(t + \beta) - a\dot{\beta} \sin(t + \beta) \quad (10.51)$$

Comparînd (10.51) cu (10.50), rezultă

$$\dot{a} \cos(t + \beta) - a\dot{\beta} \sin(t + \beta) = 0 \quad (10.52)$$

Din (10.50), rezultă că

$$\ddot{u} = -a \cos(t + \beta) - \dot{a} \sin(t + \beta) - a\dot{\beta} \cos(t + \beta) \quad (10.53)$$

Înlocuind (10.51) și (10.53) în (10.6), obținem că

$$\dot{a} \sin(t + \beta) + a\dot{\beta} \cos(t + \beta) = \varepsilon a^3 \cos^3(t + \beta) \quad (10.54)$$

Din (10.52) și (10.54), rezultă

$$\begin{aligned} \dot{a} &= \varepsilon a^3 \sin(t + \beta) \cos^3(t + \beta) \\ \dot{\beta} &= \varepsilon a^2 \cos^4(t + \beta) \end{aligned} \quad (10.55)$$

Avantajul metodei este reprezentat de faptul că, pentru ε mic, a și β variază mult mai lent decît u ca funcție de timp.

10.7. Metoda medierii

Sistemul (10.55) poate fi scris [43]

$$\begin{cases} \dot{a} = \frac{1}{8}\epsilon a^3(2\sin 2\phi + \sin 4\phi) \\ \dot{\beta} = \frac{1}{8}\epsilon a^2(3 + 4\cos 2\phi + \cos 4\phi) \end{cases} \quad (10.56)$$

unde $\phi = t + \beta$. Din aceste ecuații, se observă că

$$\dot{a} = O(\epsilon), \dot{\beta} = O(\epsilon)$$

deci a și β sînt funcții lent variabile de timp pentru ϵ mic. În primă aproximație, acestea se consideră constante pe intervalul $[0, \pi]$. Mediem ambii membri ai sistemului (10.56) pe acest interval

$$\begin{cases} \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \dot{a} dt = \frac{1}{8\pi} \epsilon \int_0^\pi a^3 (2\sin 2\phi + \sin 4\phi) dt \\ \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \dot{\beta} dt = \frac{1}{8\pi} \epsilon \int_0^\pi a^2 (3 + 4\cos 2\phi + \cos 4\phi) dt \end{cases} \quad (10.57)$$

În prima aproximație, avem

$$\begin{cases} \dot{a} = \frac{1}{8\pi} \epsilon a^3 \int_0^\pi (2\sin 2\phi + \sin 4\phi) dt \\ \dot{\beta} = \frac{3}{8} \epsilon a^2 + \frac{1}{8\pi} \epsilon a^2 \int_0^\pi (4\cos 2\phi + \cos 4\phi) dt \end{cases} \quad (10.58)$$

de unde rezultă că

$$\begin{aligned} a &= a_0 = \text{const.} \\ \beta &= \frac{3}{8} \epsilon a_0^2 t + \beta_0 \end{aligned} \quad (10.59)$$

Înlocuind (10.59) în (10.49), găsim că

$$u = a_0 \cos \left[\left(1 + \frac{3}{8} \epsilon a_0^2 \right) t + \beta_0 \right] \quad (10.60)$$

Bibliografie

1. G. Bourceanu, A. Bîrzu, "*Termodinamica evoluției și dinamică neliniară*", Ed. Matrix Rom, București, 2003.
2. E. A. Jackson, "*Perspectives of Nonlinear Dynamics*", Cambridge University Press, 1989.
3. G. Nicolis, "*Introduction to Nonlinear Science*", Cambridge University Press, 1995.
4. P. Manneville, "*Structures dissipatives, chaos et turbulence*", Collection Aléa Saclay, 1991.
5. S. H. Strogatz, "*Nonlinear Dynamics and Chaos*", Addison-Wesley, Reading, 1994.
6. A. H. Nayfeh, B. Balachandran, "*Applied Nonlinear Dynamics*", Wiley, NY, 1995.
7. G. Nicolis, I. Prigogine, "*Self-Organization in Nonequilibrium Systems*", Wiley, NY, 1977.
8. P. Glendinning, "*Stability, Instability and Chaos*", Cambridge University Press, 1994.
9. D. Kondepudi, I. Prigogine, "*Modern Thermodynamics*", Wiley, NY, 1998.
10. K. T. Alligood, T. D. Sauer, J. A. Yorke, "*Chaos – an Introduction to Dynamical Systems*", Springer, NY, 1996.
11. R. Seydel, "*From Equilibrium to Chaos*", Elsevier, NY, 1988.
12. J. K. Hale, H. Koçak, "*Dynamics and Bifurcations*", Springer, NY, 1991.
13. J. D. Murray, "*Mathematical Biology*", Springer, NY, 2002.
14. F. Verhulst, "*Nonlinear Differential Equations and Dynamical Systems*", Springer, NY, 1990.
15. P. Bergé, Y. Pomeau, Ch. Vidal, "*L'ordre dans le chaos*", Hermann, Ed. des sciences et des arts, Paris, 1988.
16. H. J. Korsch, H. J. Jodl, "*Chaos – a Program Collection for the PC*", Springer, Berlin, 1994.
17. H. G. Schuster, "*Deterministic Chaos*", VCH, Weinheim, 1995.
18. P. Gray, S. K. Scott, "*Chemical Oscillations and Instabilities*", Clarendon Press, Oxford, 1990.
19. P. Glansdorff, I. Prigogine, "*Thermodynamic Theory of Structure, Stability and Fluctuations*", Wiley, NY, 1978.
20. H. J. Kreuzer, "*Nonequilibrium Thermodynamics and its Statistical Foundations*", Clarendon Press, Oxford, 1981.

21. R. J. Field, M. Burger (Ed.), "*Oscillations and Traveling Waves in Chemical Systems*", Wiley, NY, 1985.
22. I. R. Epstein, J. A. Pojman, "*An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics*", Oxford University Press, 1998.
23. I. Prigogine, G. Nicolis, A. Babloyantz, *Physics Today*, **12**, 38, 1972.
24. M. Eigen, P. Schuster, "*The Hypercycle. A Principle of Natural Self-Organization*", Springer, Berlin, 1979.
25. G. Bourceanu, G. Moroşanu, *J. Chem. Phys.*, **82**, 3685, 1985.
26. P. Hanusse, *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. C* **277**, 263, 1973.
27. K. Shirane, T. Tokimoto, Y. Yamaguchi, *Biophys. J.*, **57**, 165, 1990.
28. H. Haken, "*Synergetics: an Introduction*", Springer, Berlin, 1983.
29. K. Krischer, în "*Modern Aspects of Electrochemistry*", vol. 32, Ed. B. E. Conway, J. O'M Bockris şi R. E. White, Kluwer Academic/Plenum Press, NY, 1999.
30. K. Krischer, în "*Advances in Electrochemical Science and Engineering*", vol. 8, Ed. R. C. Alkire şi D. M. Kolb, VCH, Weinheim, 2003.
31. A. J. Bard, L. R. Faulkner, "*Electrochemical Methods*", Wiley, NY, 2001.
32. A. Bîrzu, B. J. Green, R. D. Otterstedt, N. I. Jaeger, J. L. Hudson, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2**, 2715, 2000.
33. A. Bîrzu, B. J. Green, R. D. Otterstedt, N. I. Jaeger, J. L. Hudson, *J. Electroanal. Chem.*, **504**, 126, 2001.
34. Y. Wang, J. L. Hudson, N. I. Jaeger, *J. Electrochem. Soc.*, **137**, 485, 1990.
35. U. Franck, R. FitzHugh, *Z. Elektrochem.*, **65**, 156, 1961.
36. G. Flätgen, K. Krischer, *J. Chem. Phys.*, **103**, 5428, 1995.
37. M. Eiswirth, A. Freund, J. Ross, *Advances in Chemical Physics*, vol. **LXXX**, Ed. I. Prigogine şi Stuart A. Rice, NY, Wiley, 1991.
38. M. Eiswirth, A. Freund, J. Ross, *J. Phys. Chem*, **95**, 1294, 1991.
39. B. L. Clarke, în "*Advances in Chemical Physics*", vol. **XLIII**, Ed. I. Prigogine şi Stuart A. Rice, Wiley, 1980.
40. B. L. Clarke, *J. Chem. Phys.*, **97**, 4066, 1992.
41. J. Ross, M. O. Vlad, *Annu. Rev. Phys. Chem.*, **50**, 51, 1999.
42. J. J. Tyson, *J. Chem. Phys.*, **62**, 1010, 1975.
43. A. H. Nayfeh, "*Introduction to Perturbation Techniques*", Wiley, NY, 1981.

CĂRȚI TEHNICE - **MATRIX ROM** - CĂRȚI ACADEMICE

10 ANI DE ACTIVITATE - PESTE 1000 DE TITLURI

În domeniul **CHIMIE și INGINERIE CHIMICĂ*** au mai apărut:

- Cornel Anton, Marcela Muntean (Universitatea "Politehnica" București) - **PROCESE DE INTERFAȚĂ METAL-CERAMICĂ CORINDONICĂ** • Preț: 100000 lei
- Vlad Artenie, Romeo Artenie (Universitatea Al.I.Cuza Iași) - **INTRODUCERE ÎN METABOLISMUL LIPIDELOR** • Preț: 60000 lei
- Teodora Badea, Gabriela Ciura, Anca Cojocar (Universitatea "Politehnica" București) - **COROZIUNEA ȘI CONTROLUL COROZIUNII. FUNDAMENTE ELECTROCHIMICE** • Preț: 155000 lei
- Camelia Căpățână (Universitatea "C. Brâncuși" Tg. Jiu) - **CHIMIE GENERALĂ** • Preț: 120000 lei
- Lucia Ciohodaru (Universitatea "Politehnica" București) - **CHIMIE GENERALA PENTRU INGINERI** • Preț: 185000 lei
- Lucia Ciohodaru (Universitatea "Politehnica" București) - **LUCRĂRI PRACTICE DE LABORATOR PENTRU DISCIPLINA CHIMIE GENERALĂ** • Preț: 40000 lei
- Dănuț Cozma, Aurel Pui (Universitatea Al.I.Cuza Iași) - **CONCEPTE ȘI METODE ÎN PREDAREA - ÎNVĂȚAREA CHIMIEI** • Preț: 110000 lei
- Silvia Curteanu, Victor Bulacovschi (Universitatea tehnică Gh. Asachi Iași) - **MODELAREA ȘI SIMULAREA REACȚIILOR CONTROLATE DE DIFUZIE ÎN POLIMERIZAREA RADICALICĂ** • Preț: 69000 lei
- Silvia Curteanu, G. Lina, N. Aelenei (Universitatea tehnică Gh. Asachi Iași) - **APLICAȚII DE CHIMIE FIZICĂ REZOLVATE ÎN MATHCAD** • Preț: 145000 lei
- I. Demetrescu (Universitatea "Politehnica" București) - **CHIMIE ȘI MANAGEMENT DE MEDIU** • Preț: 75000 lei
- T. Dobre, O. Floarea (Universitatea "Politehnica" București) - **INGINERIE CHIMICĂ. ELEMENTE DE INGINERIA PRELUCRĂRII CHIMICE A SUPRAFEȚELOR** • Preț: 110000 lei
- Gh. Duca, Iurie Scurlatov, Aurelio Misiti, Matei Macoveanu, M. Surpățeanu (Universitatea de Stat Chișinău, Universitatea Roma, Universitatea tehnică Gh. Asachi Iași) - **CHIMIE ECOLOGICĂ** • Preț: 145000 lei
- O. Floarea, T. Dobre (Universitatea "Politehnica" București) - **INGINERIE CHIMICĂ. TRANSFERUL CANTITĂȚII DE MIȘCARE** • Preț: 170000 lei
- A. Stoica Guzun, M. C. Stroescu, T. Dobre, O. Floarea (Universitatea "Politehnica" București) - **INGINERIE CHIMICĂ. OPERAȚII DE TRANSFER INTERFAZIC** • Preț: 140000 lei
- Matei Macoveanu (Universitatea tehnică "Gh. Asachi" Iași) - **PROCESE DE SCHIMB IONIC ÎN PROTECȚIA MEDIULUI** • Preț: 165000 lei
- Dana Ofițeru, Vasile Lavric (Universitatea "Politehnica" București) - **INTRODUCERE ÎN BIOINGINERIA CELULELOR ANIMALE** • Preț: 50000 lei
- Maria Pele (Universitatea agronomică București) - **CHIMIE ANALITICĂ ȘI ANALIZA INSTRUMENTALĂ** • Preț: 140000 lei
- Ștefan Petrescu, Silvia Curteanu (Universitatea tehnică Gh. Asachi Iași) - **REACTOARE CHIMICE PENTRU SISTEME OMOGENE** • Preț: 140000 lei
- Aurel Pui, Dănuț Cozma (Universitatea Al.I.Cuza Iași) - **BAZELE CHIMIEI COMPUȘILOR COORDINATIVI** • Preț: 130000 lei
- Felicia Săndescu - **POLIMERI ACRILICI FILABILI. ACTUALITĂȚI ÎN CHIMIA ȘI TEHNOLOGIA POLIMERILOR** • Preț: 140000 lei
- Carmen Teodosiu (Universitatea tehnică "Gh. Asachi" Iași) - **TEHNOLOGIA APEI POTABILE ȘI INDUSTRIALE** • Preț: 155000 lei

Ofertele complete și gratuite pe domenii se pot solicita telefonic. Achiziționarea cărților se poate face direct de la sediul editurii, prin colet poștal cu plata ramburs (pe baza unei comenzi scrise) sau de la distribuitorii din București (librăria RAMA, librăria 164, librăria AGIR, librăria Lucașăru, librăria Universității), Bacău, Brașov, Cluj Napoca, Constanța, Craiova, Iași, Oradea, Pitești, Râmnicu Sărat, Reșița, Sibiu, Târgu Jiu, Timișoara. Clienții primesc periodic informații despre noile lucrări apărute sau în curs de apariție.

• Prețurile din această listă sunt prețuri de vânzare directă, valabile începând cu 01.10.2003